جامعة أم القرى
كلية العلوم التطبيقية
شعبة الفيزياء الطبية



ميكانيكا الكم

د. سعود بن حميد اللحياني

حدود الفيزياء الكلاسيكية

THE LIMITS OF CLASSICAL PHYSICS

ميلاد النظرية الكمية The Dawn of the Quantum Theory

في نهاية القرن التاسع عشر، اعتقد كثير من العلماء أن كل الاكتشافات العلمية قد تم إنجازها وفهمها وأنه لم يبقى إلا بعض المسائل البسيطة التي تحتاج لمزيد من الإيضاح. إن هذه القناعة وكانت ناشئة من التقدم العلمي في مجالات شتى والذي تمثل – على سبيل المثال – في ميكانيكا نيوتن Newton والتي طُورت بواسطة العالمان لاجرانج وهاملتون J. LaGrange and W. Hamilton. حيث تم استخدام هذه النظرية لوصف حركة الكواكب وكذلك فهم كثير من الظواهر المعقدة مثل نظرية المرونة elasticity theory وديناميكا الموائع hydrodynamic إنجازات العالم جول وبيان تكافؤ الشغل والحرارة، أبحاث كارنوت Carnot والتي أدت لفهم الإنتروبي والقانون الثاني للديناميكا الحرارية، وما يتبع هذه الأبحاث من تطوير على يد العالم جبس J. Gibbs لإرساء أسس علم الديناميكا الحرارية.

وشهدت مجالات أخرى من الفيزياء (مثل الضوء والنظرية الكهرومغناطيسية optics and electromagnetic theory) إنجازات ملحوظة. فمثلاً، الاستنتاجات الهامة التي توصل إليها العالم ماكسويل J. Maxwell متمثلة بمعادلاته الشهيرة "والبسيطة" والتي وَحّدت مجالات الضوء والكهربية والمغناطيسية وما يتبع هذه الأبحاث من التجارب المعملية بواسطة العالم هيرتز H. Hertz في عام 1887 والتي أدت إلى إثبات الطبيعة الموجبة للضوء.

كل هذه الإنجازات في المجالات المختلفة للفيزياء كوَّنت ما يُعـرف الآن بالفيزياء التقليدية Classical physics ومع بداية القرن العشرين، وُجدت بعض النتائج التجريبية الجديدة والتي استلزم تفسيرها مفاهيم فيزيائية جديدة تتناقض مع مبادئ الفيزياء الجديدة ولد ما يسمى الآن بالنظرية الكمية quantum theory وسنحاول في هذا الفصل أن نصف خلفية هذه الأزمات لنصل من خلالها لمعرفة النظرية الكمية.

ويمكننا تلخيص المفاهيم الفيزيائية الجديدة في: الخواص الجسيمية للإشعاع the particle properties of radiation، الخواص الموجية للمادة the wave properties of matter، وتكميم الكميات الفيزيائية the quantization of physical quantities. وسنقوم في هذا الفصل بمناقشة هذه المفاهيم.

1-1. إشعاع الجسم "الأسود"

1-1 Blackbody Radiation

- الفيزياء التقليدية لم تتمكن من شرح إشعاع الجسم الأسود

- Blackbody Radiation could not be explained by classical physics

من أهم النتائج التجريبية التي أحدثت ثورة في المفاهيم الفيزيائية التقليدية تلك المتعلقة بالإشعاع الصادر من الأجسام عند تسخينها. فمن المعلوم عند تسخين جسم ما، نجد أن لونه يتغير مع زيادة درجة الحرارة حيث يبدأ بالأحمر ثم الأبيض ثم الأزرق. وبدلالة التردد، نقول أن الإشعاع المنبعث من هذا الجسم يبدأ بترددات منخفضة، وعند ارتفاع درجة الحرارة، تزداد الترددات، حيث أن اللون الأحمر ذو تردد قليل في منطقة طيف الإشعاع وذلك مقارنة باللون الأزرق. إن طيف التردد للإشعاع المنبعث من جسم ما يعتمد على طبيعة الجسم نفسه، ولكن الجسم المثالي deal body، والذي يمتص أو يبعث كل الترددات

يُسمى بالجسم الأسود ويعتبر حالة مثالية لأي مادة تُصدر إشعاع. الإشعاع المنبعث من "جسم أسود" يسمى إشعاع الجسم الأسود.

an ideal body, which absorbs and emits all frequencies, is called a blackbody and serves as an idealization for any radiating material, the radiation emitted by a blackbody is called blackbody radiation.

شكل 1-1 يوضح تغير شدة الإشعاع الصادر من جسم أسود مع التردد وذلك عند درجات حرارة مختلفة. وقد حاول العديد من الفيزيائيين استنتاج معادلة رياضية تشرح النتائج التجريبية (في شكل 1-1) ولكن بدون توافق كامل وأولى المحاولات لوصف هذه النتائج قام بها كل من العالمين رالي وجينز Rayleigh and Jeans والتي اشتقت بناءاً على قوانين القرن التاسع عشر ويمكن كتابة هذه العلاقة بالصيغة:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi K_B T}{C^3} \nu^2 \qquad (1\text{-}1)$$

حيث $u(\nu, T)$ كثافة الطاقة energy density ووحدتها جول لكل متر مكعب (J/m^3). في المعادلة (1-1)، Tدرجة الحرارة بالكيلفن، c سرعة الضوء، K_B ثابت بولتزمان. الخط المتقطع في شكل 1-1 يبين العلاقة حسب معادلة رالي- جينز. لاحظ التوافق بين هذه العلاقة والنتائج التجريبية عند الترددات المنخفضة. عند الترددات العالية، وحسب معادلة رالي-جينز، فإن كثافة الإشعاع تزداد طبقاً لـ ν^2 وتصل إلى مالا نهاية وذلك عندما تصل الترددات إلى مالا نهاية وهذا يحدث في منطقة الأشعة فوق البنفسجية ultraviolet وهذا ما يعرف بالانهيار فوق بنفسجي ultraviolet catastrophe. من المعادلة (1-1) ولكل الترددات من صفر إلى مالا نهاية.

$$\int_0^\infty u(\nu, T)\, d\nu = \int_0^\infty \frac{8\pi k_B T}{C^3} \nu^2\, d\nu \to \infty$$

وهذه النتيجة تتناقض مع النتائج التجريبية حيث أن شدة الإشعاع تزداد مع زيادة التردد لتصل إلى أقصى قيمة عند تردد معين نرمز له بـــ n_{max} ثم تقل إلى الصفرة هذا يعني أن قيمة التكامل لا تساوي مالا نهاية. ومن الجـــدير بالـــذكر كذلك ملاحظة أن n_{max} تتغير مع تغير درجة الحرارة كما هو موضح بالشكل.

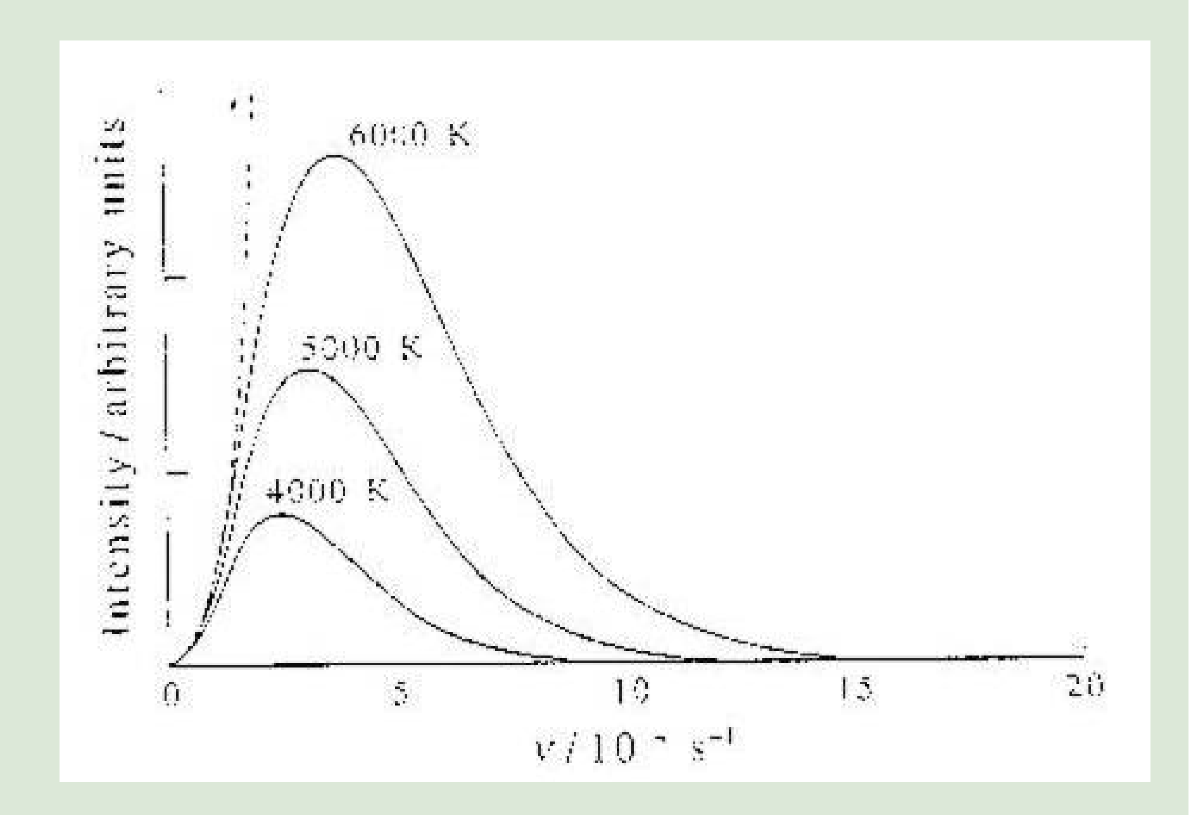


FIGURE 1.1

Spectral distribution of the intensity of blackbody radiation as a function of frequency for several temperatures. The intensity is given in arbitrary units. The dashed line is the prediction of classical physics. As the temperature increases. The maximum shifts to higher frequencies and the total radiated energy (the area under each curve) increases significantly. Note that the horizontal axis is labeled by $n/10^{14}\ s^{-1}$. This notation means that the dimensionless numbers on that axis re frequencies divided by $10^{14}\ s^{-1}$. We shall use this notation to label columns in tables and axes in figures because of its unambiguous nature and algebraic convenience.

كيف تم حل هذا الإشكال بين النظرية والتجارب العملية؟

2-1 توزيع بلانك وتكميم الطاقة

1-2 The Planck Distribution and the Quantum of Energy

إن أول من قدم تفسير صحيح لإشعاع الجسم الأسود هو العالم الألماني ماكس بلانك Max Planck في عام 1900. وفي نظريته، افترض بلانك أن الإشعاع المنبعث من الجسم الأسود من اهتزاز الإلكترونات المكونة لمادة الجسم. ولكون هذه الاهتزازات ذات ترددات عالية فإننا نجد في طيف الإشعاع المنبعث ترددات في منطقة الضوء المرئي والأشعة تحت الحمراء وفوق البنفسجية بينما لا نجد أي من ترددات الراديو في هذا الطيف. طبقاً لنظرية رالي-جينز، فإنه مفهوم ظمناً أن طاقة الإلكترونات المهتزة، والتي هي سبب انبعاث الإشعاع من المادة- مسموح لها أن تأخذ أي قيمة من الطاقة. وهذه الفرضية هي إحدى الأساسيات الفرضية في الفيزياء التقليدية. في الفيزياء التقليدية، الكميات الفيزيائية المتغيرة والتي تُمثل مشاهدات (مثل الموقع Position، كمية الحركة Momentum والطاقة energy) يمكن تملك قيم متصلة.

In classical physics, the variables that represent observables (such as position, momentum and energy) can take on a continuum of values.

ولقد أدرك العالم بلانك – بعمق تفكيره – بضرورة إحداث تغيير جذري وجوهري في هذا المفهوم الفيزيائي فكانت فرضيته الانقلابية في الفيزياء الحديثة: طاقة الإلكترونات المهتزة مكممة وقيمها غير متصلة وتتناسب برقم كمي صحيح مع التردد وذلك من خلال المعادلة $E=nh\nu$

Energies of the oscillators were discrete and had to be proportional to an integral multiple of the frequently in an equation of the form E = nh$v$

حيث E هي طاقة المتذبذب، n هو رقم صحيح، h ثابت التناسب ويُعرف بثابت بلانك، و v هو تردد المتذبذب.

وبناءاً على مبدأ تكميم الطاقة ومفاهيم ديناميكا حرارية إحصائية، تمكــن بلانك من استنتاج العلاقة الرياضية التالية:

$$u(v_1 T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{v^3}{e^{hv/k_B T} - 1} \tag{1-2}$$

وهذه العلاقة تتفق تماماً مع النتائج التجريبية عند كل الترددات ودرجات الحرارة المعادلة (1-2) تُعرف بتوزيع بلانك لإشعاع الجسم الأسود

Planck distribution lance for black body radiation.

(i) عند الترددات المنخفضة، تؤول معادلة بلانك إلى معادلة رالي-جينز بالنظر إلى النسبة $\frac{hv}{k_B T}$ فعندما تكون v صغيرة فإن $\frac{hv}{k_B T} \ll 1$

من مكنون تايلور للدالة الأسية $e^v = 1 + v + \frac{v^2}{2_i} + \ldots$

إذا كانت v صغيرة، يمكننا إهمال الحدود ذات الأســس العليــا وعليــه $e^v \approx 1 + v$ وذلك إذا كانت $v \ll 1$ في هذه الحالة يمكننا كتابة معادلة بلانك

$$u(v_1 T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{v^3}{1 + \frac{hv}{vT} - 1} = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{v^3}{\frac{hv}{k_B T}}$$

$$u(v_1 T) = \frac{8\pi}{c^3} K_B T v^3 \tag{1-3}$$

وهذه هي معادلة رالي- جينز.

(ii) الطاقة الكلية

$$u(t)=\int_0^\infty u(v_1T)\,dv=\frac{8\mathbf{D}h}{c^3}\int_0^\infty dv\,\frac{v^3}{e^{hv/k_BT}-1}$$

ولإجراء هذا التكامل نعوض عــن $v=\frac{hv}{k_BT}$، هــذا يعنــي أن $dv=\frac{h}{k_BT}dv$

ويمكننا كتابة dv بدلالة dv و $dv=\frac{k_BT}{h}dv$. حدود التكامل لم تتغير، بــالتعويض

عن v بــ $\frac{k_BT}{h}v$ وكذلك dv بدلالة dv نتحصل على

$$u(v,T)=\frac{8\mathbf{D}h}{c^3}\int_0^\infty\left(\frac{kT}{h}\right)^3\frac{v^3}{e^v-1}\left(\frac{kT}{h}\right)dv$$

$$=\frac{8\mathbf{D}h}{c^3}\int_0^\infty\left(\frac{kT}{h}\right)^4\frac{v^3}{e^v-1}dv=\frac{8\mathbf{D}h}{c^3}\left(\frac{k_BT}{\mathbf{D}}\right)^4\int_0^\infty\frac{v^3}{e^v-1}dv$$

التكامل $\int_0^\infty\frac{v^3}{e^v-1}dv$ قيمته تساوي $\frac{\mathbf{D}^4}{15}$

$$\therefore u(T)=\frac{8\mathbf{D}h}{c^3}\left(\frac{k_BT}{h}\right)^4\frac{\mathbf{D}^4}{15}=\frac{8\mathbf{D}^5}{15c^3}\left(\frac{k_B}{h}\right)^4T^4$$

$$=\ aT^4\ ....\qquad(1-4)$$

حيث:

$$a=\frac{8\mathbf{D}^5}{15c^3}\left(\frac{k_B}{h}\right)^4$$

المعادلة (1-4) تمثل ما يعــرف بقــانون ســتيفان- بولتزمــان -Stefan Boltzman للطاقة الكلية لكل وحدة الحجوم.

(iii) معادلة بلانك تمكننا من إ – ج قانون واين Wien والذي ينص على أنه إذا كانت l_{max} تمثل الطول الموجي المقابل لأقصى قيمة لكثافة الطاقة u فإن حاصل ضرب l_{max} في درجة الحرارة T يعطينا قيمة ثابتة، أي:

$$\lambda_{max}T=2.90\times10^{-3}\,m.K\qquad..(1-5)$$

وللحصول على معادلة (1-5) من معادلة بلانك.

لكي نوجد القيمة القصوى لــ $u(n)$ يلزم أن تفاضل الدالة $u(n)$ بالنسبة لــ v وتساوي هذا التفاضل بالصفر، أي $\frac{dv(n)}{dv}=0$

or

$$\frac{d}{dv}\left[\frac{8\pi h}{c^3}\frac{v^3}{e^{hv/k_BT}-1}\right]=0$$

ومرة أخرى نعوض عن $v\nu\frac{k_BT}{h}dv\ ,\ v=\frac{hv}{k_BT}$

وبقسمة طرفي المعادلة على كل الثوابت نتحصل على.

$$3(e^v-1)-ve^v=o$$
$$3e^v-3=ve^v$$

بالقسمة على e^v

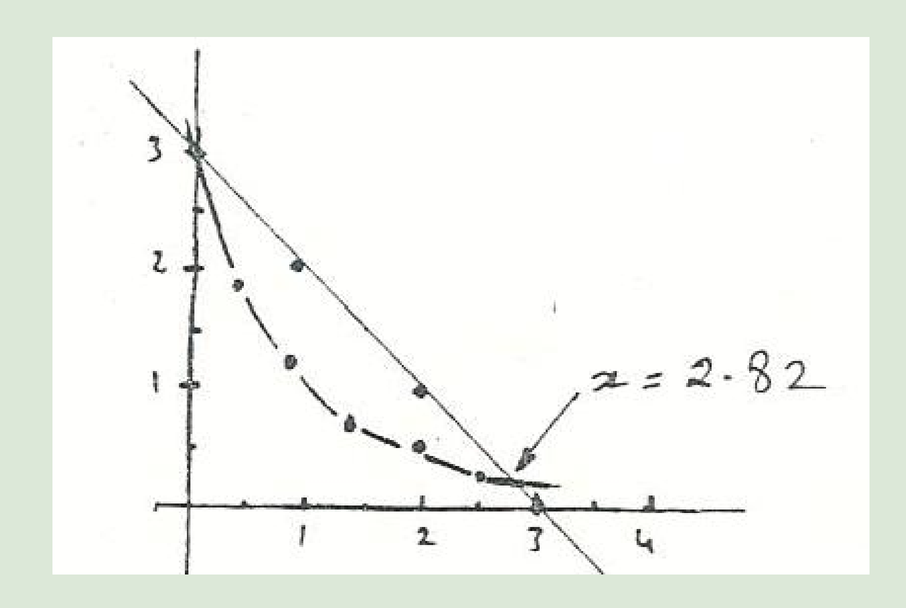
$$3-3e^{-v}=v$$

or

$$3-v=3e^{-v}$$

ويمكن حل هذه المعادلة من خلال نقطة التقاطع بين الدالتين

(3-v) و ($3e^{-v}$) كما هو موضح بالرسم في شكل (٤-١)



شكل 2-1: حل المعادلة $3 - x = 3e^{-x}$ بالرسم

من الشكل، نجد أن

$$v = 2.82$$

or

$$\frac{hv_{mar}}{k_B T} = 2.82$$

or

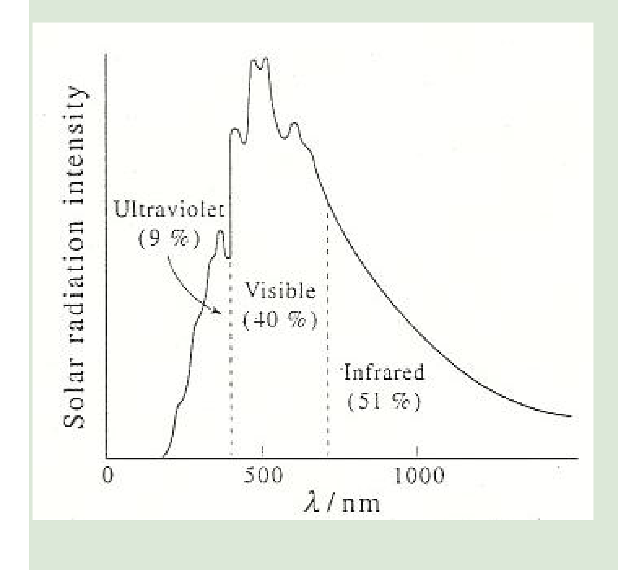
$$v_{max} = \frac{k_B T}{h}(2.82)$$

$$\therefore \frac{c}{\lambda_{max}} = \frac{h_b T}{h}(2.82)$$

$$\text{or}\,\lambda_{max} T = \frac{hc}{2.82K_B} = \frac{(6.63\times10^{-34}\,J.s)(3.0\times10^{8}\,m/s)}{(2.82)(1.38\times10^{-23}\,J.v^{-1})} = 2.9\times10^{-3}\,m.K$$

ومن الجدير بالذكر، أن نظرية إشعاع الجسم الأسود تستخدم في علم الفلك وذلك لتحديد درجة حرارة النجوم. بالنظر لشكل والذي يوضح طيف إشعاع الشمس مقاس من طبقات الجو العليا للأرض، نجد أن قيمة $l_{max} = 500nm$ (حيث $1nm = 10^{-9}$ m)، وباستخدام قانون واين يتبين أن درجة حرارة الشمس.

$$T = \frac{2.9\times10^{-3}\,m.k}{\lambda_{max}} = \frac{2.9\times10^{-3}\,m.k}{500\times10^{-3}\,m} = 5800k$$



الطيف الكهرومغناطيسي لأشعة الشمس.

FIGURE 1.3 The electromagnetic spectrum of the sun as measured in the upper atmosphere of the earth. A comparison of this figure with Figure 1.2 shows that the sun's surface radiates as a blackbody at a temperature of about 6000 k.

وبعدما عرفنا الطبيعة الكمية للطاقة (ممثلة quanta) وهي nv فإن هـذا يعني أن شعاع طوله الموجي $\lambda = 6000\,\mathring{A}$ (حيث $1\mathring{A} = 10^{-10}\,m$) طاقته تساوي.

$$E = hv = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6.63\times10^{34}\,J.s)\,(3\times10^{8}\,m/s)}{(6000\times10^{-10}\,m}$$
$$= 3.3\times10^{-19}\,J = 2.06\,ev$$

فإذا كان هذا الشعاع صادر من مصدر قدرتـه 100 واط (W) (وحـدة الواط Watt هي جول لكل ثانية (W: Joul/sec)، هذا معناه أن إذا كانت N ترمز لعدد الكمات في الثانية الواحدة، فإذا كانت كل كم من الطاقة تـساوي hv فـإن القدرة Power = N (hv).

$$\therefore P = 100 = W = N\,hv$$
$$\therefore N = \frac{P}{E} = \frac{100W}{3.3\times10^{-19}\,J} = 3\times10^{20}\ \text{guanta/sec}$$

وهذا بلا شك عدد كبير جداً من الكمات مما يؤدي إلى عـدم إحـساسنا بالطبيعة الجسيمية للضوء (على افتراض أن كل كم من الطاقة هو جسيم).

1-3 The Photoelectric Effect — 3-1 التأثير الكهروضوئي

في عام 1886 ,1887 وبينما كان يجري تجاربه التـي أكـدت نظريـة ماكسويل الخاصة بالطبيعة الموجية للضوء، اكتشف الفيزيائي الألماني هينـرك هيرتز Heinrich Hertz أن الأشعة الضوئية الفوق بنفـسجية ultraviolet light تسبب انطلاق (انبعاث) emission الإلكترونات من سطح معدن بالإشعاع يسمى بالتأثير الكهروضوئي.

وطبقاً لقوانين الفيزياء التقليدية، فإن الإشعاع الكهرومغناطيسي عبارة عن مجال كهربي يتذبذب عمودياً على اتجاه انبعاث الإشعاع (هنا أهملنـا المجـال

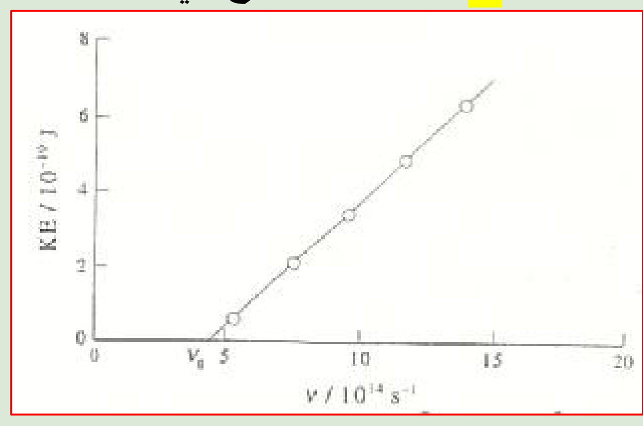
المغناطيسي). والذي نريد أن نركز عليه هنا أن شدة الأشعة intensity of the radiation تتناسب مع مربع سعة المجال الكهربي.

The intensity of the radiation is proportioned to the square of the amplitude of the .oscillating electric field.

ويمكن للالكترونات التي على سطح المعدن أن تتذبذب مع المجال الكهربي الساقط عليها، وكلما ازدادت شدته (سعته) تزداد سعة تذبذب الإلكترونات كثيراً مما يؤدي في النهاية إلى كسر ارتباطها بالسطح وانطلاقها بطاقة حركية kinetic energy والتي ستعتمد على سعة (شدة) المجال الكهربي للإشعاع الساقط. إن هذا التفسير الفيزيائي (التقليدي) يتعارض تماماً مع المشاهدات الفيزيائية لهذه الظاهرة والتي تمثلت في:

1- وُجد أن الطاقة الحركية للإلكترونات المنبعثة من السطح لا تعتمد على شدة الانبعاث independent of the intensity of incidental.

2- وجد تجريبياً أن الإلكترونات لا تنبعث من السطح إلا إذا كان تردد الإشعاع الساقط أكبر من تردد معين $n_\circ$ بغض النظر عن شدة الإشعاع سنسمي هذا التردد $n_\circ$ بعتبة التردد threshold frequency وقيمة $n_\circ$ تعتمد على نوع المعدن. وكذلك وجد أن الطاقة الحركية للالكترونات المنبعثة تتناسب خطياً مع التردد n وذلك إذا كانت n أكبر من $n_\circ$ كما هو موضح في شكل 4-1.



شكل 4-1: تغير قيم الطاقة الحركية للإلكترونات مع التردد.

FIGURE 1.4 The kinetic energy of electrons ejected from the surface of sodium metal versus the frequency of the incident ultraviolet radiation. The threshold frequency here is 4.40×10^{14} Hz (1 Hz = 1 s^{-1})

ولتفسير هذه النتائج، طور العالم اينشتاين فرضية بلانك من تكميم الطاقة. وهنا نذكر أن بلانك طبق مفهوم تكميم الطاقة فقط على المتذبذب الذي يمتص أو يبعث الطاقة (فإذا مصدر تردده n فإنه يملك طاقة $E=nhn$) أما إذا ما انبعث الإشعاع من هذا المتذبذب فإنه يسلك (كما اقترح بلانك) كموجة عادية تخضع للمفاهيم الفيزيائية التقليدية. أما العالم اينشتاين فقد ذهب إلى ما هو أبعد من هذا، فقال إن التكميم لا ينطبق فقط على المتذبذب بل إن الإشعاع المنبعث منه ينبعث كمات من الطاقة (أو حُزَمْ من الطاقة) منفصلة عن بعضها وطاقة كل كم $E=hn$ وأطلق اسم الفوتون photon عليه.

Einstein proposed that the radiation itself existed as smell packers of energy, $E=hn$, now known as photons.

وبناءاً على مبدأ حفظ الطاقة Conservation of energy، وضح اينشتاين أن الطاقة الحركية $K.E=\frac{1}{2}mv^2$ (التي ينبعث بها الإلكترون ذو الكتلة m والسرعة v) من سطح المعدن عبارة عن الفرق بين الطاقة الساقطة للفوتون hn وأقل طاقة لازمة لنزع الإلكترون (وتحريره) من طاقة ربطة بالمعدن W (ويرمز لها أحياناً بـ ϕ) والتي تسمى دالة الشغل Work function.

ويمكننا صياغة ما سبق ذكره بالمعادلة التالية:

$$K.E=\frac{1}{2}mv^2=hv-\varphi \qquad (1-5)$$

لاحظ أن قيمة $\frac{1}{2}mc^2$ موجبة وعليه فالفرق $hv-\varphi$ لا يمكن أن يكون سالب. أي أنه $hv \geq \varphi$. إن اقل قيمة لـ hn هي الطاقة اللازمة لتحرير الإلكترون من ربط النواة وهذا يحدث عن عتبة التردد $n_{\circ}$ أي أن:

$$hv_{\circ}=\varphi \qquad (1-6)$$

ويمكننا كتابة معادلة (1-5) على الصورة.

$$\frac{1}{2}mc^2 = hv - hv_\circ \qquad (1\text{-}7)$$

وهذه معادلة خط مستقيم (على الصورة y = mx-c) وهو تماماً ما يشاهد من النتائج التجريبية الموضحة في شكل 1-5.

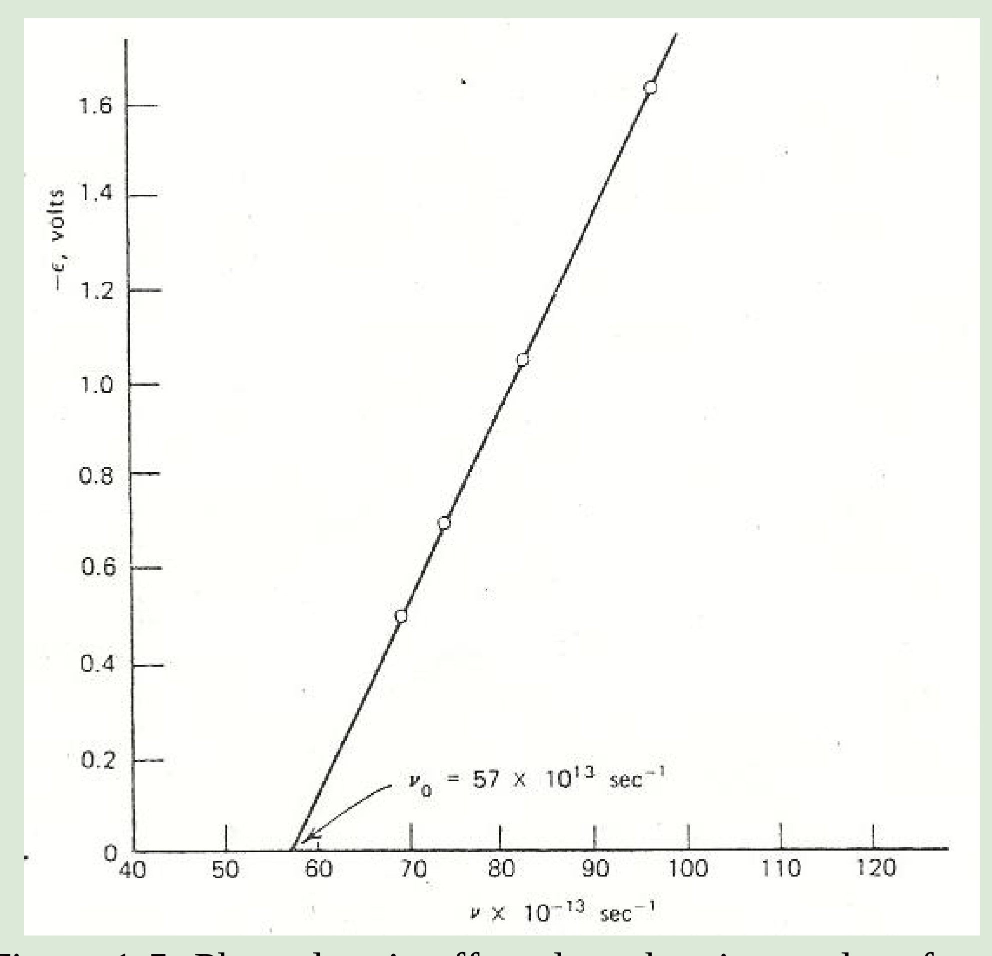


Figure 1-5. Photoelectric effect data showing a plot of retarding potential necessary to stop electron flow from a metal (lithium), or equivalently, electron kinetic energy, as a function of frequency of the incident light, the slope of the line is *h/e*.

وقبل أن ننتقل لموضوع آخر، من المهم أن نوضح الوحدات المستخدمة في المعادلة. بالنسبة لـ f عادة تعطي بوحدة الإلكترون فولت eV، وهذه وحدة طاقة، ولحساب (مثلاً) سرعة الإلكترون المنبعث بوحدة m/s فمن المهم أن يعرف الطالب كيف يقوم بعملية التحويل بطريقة صحيحة.

أولاً: من تعريف الإلكترون فولت

(1 coulomb) (1 volt) = 1 Joule

والشحنة الأولية للبروتون تساوي

والشحنة الأولية للبروتون تساوي $1.6\times10^{-19}\,C$ عندئذ

(J ترمز للجول)

$$1eV=(1.6\times10^{-19}\,C)(1V)$$
$$=1.6\times10^{-19}\,J$$

مثال2: دالة الشغل للصوديوم تساوي en 1.82، احسب عتبة التـــردد $n_{\circ}$ للصوديوم؟

الحل: أولاً: يلزم تحويل f من eV إلى جول:

$$\varphi=1.82\,eV$$
$$=(1.82\,eV)(1.6\times10^{-19}\,\frac{J}{eV})$$
$$=2.92\times10^{-19}\,J$$

ومن معادلة (1-6) $[h\nu_{\circ}=\varphi]$ يمكننا حساب $n_{\circ}$

$$\nu_{\circ}=\frac{\varphi}{h}=\frac{(2.92\times10^{-19}\,J)}{(6.63\times10^{-3}\,J.S)}$$
$$=4.40\times10^{14}\,\frac{1}{5}=4.40\times10^{14}\,H_{2}$$

حيث Hz ترمز للهرتز وهو $1/5\,ec$

مثال3:

أشعة فوق بنفسجية طولها الموجي Å 3500 تسقط على سطح بوتاسيوم. أقصى طاقة للإلكترونات الضوئية تساوي 1.6 eV.

احسب دالة الشغل للبوتاسيوم؟

الحل:

من معادلة (1-5)

$$K.E = h\nu - \phi$$

$$\therefore \varphi = h\nu - k.E$$

نحسب أولاً قيمة $h\nu$

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6.63\times10^{-34}\ J.s)(3\times10^{8}\ m/s)}{(3500\times10^{-10}\ m)}$$

ولتحويل هذه القيمة من الجول للإلكترون فولت

$$\therefore \varphi = 3.eV - 1.6eV = 1.95eV$$

مثال: عند تعرض سطح مادة الليثيوم للإشعاع، فإن الطاقة الحركية للإلكترونات المنبعثة $2.935\times10^{-19}\ J$ وذلك إذا كانت $\lambda = 300.0nm$.

إما إذا كانت $\quad = l$ فإن الطاقة الحركية تساوي $1.28\times10^{-19}\ J$

احسب (a) ثابت بلانك؟

(b) عتبة التردد؟

(c) الشغل؟

الحل: من معادلة (1-5) في حالة الطول الموجي الأول والطول الموجي الثاني نتحصل على $(K.E)_1 - (K.E)_2 = h(\nu_1 - \nu_2) = hc\,(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2})$

بالتعويض: $2.935\times10^{-19}\ J - 1.280\times10^{-19}\ J = h\,(3\times10^{8}\ m/s)\left[\frac{1}{3\times10^{-9}\ m} - \frac{1}{400\times10^{-9}\ m}\right]$

$$\therefore h \frac{1.655\times10^{19}\ \text{J}}{2.498\times10^{14}\ \text{s}^{-1}} = 6.625\times10^{-34}\ \text{J.S}$$

(b) لحساب عتبة التردد، نأخذ الطول الموجي (مثلاً) $\lambda = 300\ \text{nm}$

$$\therefore\ \ = h\nu - h\nu_{\circ}$$

$$\therefore\ 2.935\times10^{-19}\ \text{J} = \frac{hc}{300\times10^{-9}\ \text{m}} - h\nu_{\circ}$$

وبالتعويض عن قيم c,h نجد أن قيمة $\nu_{\circ}$

$$\nu_{\circ} = 5.564\times10^{14}\ \text{Hz}$$

(٢) دالة الشغل تحسب مباشرة من العلاقة $f = h\nu_{\circ}$

$$= 3.687\times10^{-19}\ \text{J}$$

$$= \frac{3.687\times10^{19}\ \text{J}}{1.6\pm\times10^{-19}\ \frac{\text{J}}{\text{eV}}} = 2.30/\text{eV}$$

4-1 تأثير كومبتون:

1-4 The Compton Effect

التجربة التي تؤكد بوضوح الطبيعة الجسيمية للإشعاع the particle nature of radiation تسمى بتأثير (ظاهرة) كومبتون نسبة للعالم كومبتون Arthur H. Compton لقد اكتشف كومبتون أنه إذا اخترق إشعاع ذو طول موجي (في منطقة الأشعة السينية X-ray) شريحة معدنية فسيتبعثر scattered بطريقة لا يمكن تفسيرها حسب النظرية التقليدية للإشعاع.

الذي تخبرنا به قوانين الفيزياء التقليدية أن شدة الإشعاع I المنبعث من مادة نتيجة تأثرها بإشعاع سقط عليها (مما يؤدي إلى اهتزاز إلكتروناتها والتي بدورها ستبعث إشعاع) عندما تقاس عند زاوية θ (بالنسبة لاتجاه الأشعة الساقطة) فإن I تتغير مع θ حسب العلاقة

$$I \approx (1+\cos^2\theta) \quad (1\text{-}8)$$

وهذا يعني أن I لا تعتمد على الطول الموجي للأشعة الساقطة، وهذا يتعارض بوضوح مع النتائج التجريبية (شكل 1-6) والتي يتبين بوضوح تغير I بتغير l.

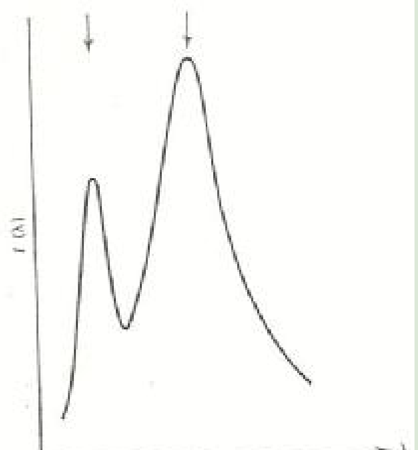


Figure 1-6. The spectrum of radiation scattered by carbon, showing the unmodified line at 0.7078 Å on the left and the shifted line at 0.7314 Å on the right. The former is the wave-length of the primary radiation.

نتائج تجربة كومبتون:

لقد وجد كومبتون أن الإشعاع المتبعثر له مركبتين؛ مركبة طولها الموجي مساوٍ لطول موجة الإشعاع الساقط ومركبة أخرى تختلف في طولها الموجي عن الطول الموجي للإشعاع الساقط وتعتمد على زاوية البعثرة وقد تمكن كومبتون من شرح وجود مركبة الإشعاع المتبعثرة ذات الطول الموجي المختلف عن الطول الموجي الساقط وذلك باعتبار الشعاع الساقط عبارة عن شعاع من الفوتونات بطاقة $h\nu$ حيث يعاني كل فوتون من تبعثر (تشتت) مرن elastic scattering مع كل إلكترون.

وكما هو معلوم، في حالة التشتت المرن فإن كمية الحركة momentum والطاقة energy كميات تخضع لقانون الحفظ (البقاء) momentum and energy must be conserved.

ولتفسير هذه الظاهرة رياضياً، افترض كومبتون أن الفوتون لـــه كميـــة حركة p تعطي بالعلاقة

$$p=\frac{hv}{c} \quad (1\text{-}9)$$

حيث تم اعتبار الحركة الديناميكية للفوتون كجسيم يخضع لقوانين النظرية النسبية والتي توضح العلاقة بين الطاقة وكمية الحركة.

$$E=\left[(m_o c^2)^2+(pc)^2\right]^{1/2} \quad (1\text{-}10)$$

حيث m_o هي الكتلة السكونية rest mass للجسيم، وسرعة الجسيم v عند كمية الحركة p تعطى بالعلاقة

$$v=\frac{aE}{ap}=\frac{d}{dp}\left[(m_o c^2)^2+(pc)^2\right]^{1/2}$$

$$=\frac{1}{2}=\left[(m_o c^2)^2+(pc)^2\right]^{-\frac{1}{2}}\frac{d}{ap}(pc)$$

$$=\frac{1}{2}\frac{1}{\left[(m_o c^2)^2+(pc)^2\right]^{1/2}}(pc)c$$

$$\therefore v=\frac{pc^2}{E}=\frac{pc^2}{(m_o^2c^4+p^2C^2)^{1/2}} \quad (1\text{-}11)$$

في حالة الفوتون، نعوض عن $m_o=o$ و $v=c$ في معادلة (1-11)

$$\therefore C=\frac{pc^2}{E}\Rightarrow E=pc \quad (1\text{-}12)$$

من معادلة (1-12) نتحصل على معادلة (1-9) حيث $E=hv$

$$p=\frac{E}{C}=\frac{hv}{C}$$

دعنا نفترض الآن وجود فوتون بكمية حركة ابتدائيـــة p_o ســـاقط علـــى إلكترون ساكن. وبعد التصادم، نفترض أن كميـــة الحركـــة للفوتـــون p أمـــا

الإلكترون فيحدث له ارتداد recoil بكمية حركة p_e. وبتطبيق قانون بقاء كمية الحركة (انظر شكل 1-7).

$$\vec{p}_e = \vec{p}_\circ + \vec{p} \quad (1\text{-}13)$$

بتربيع طرفي المعادلة.

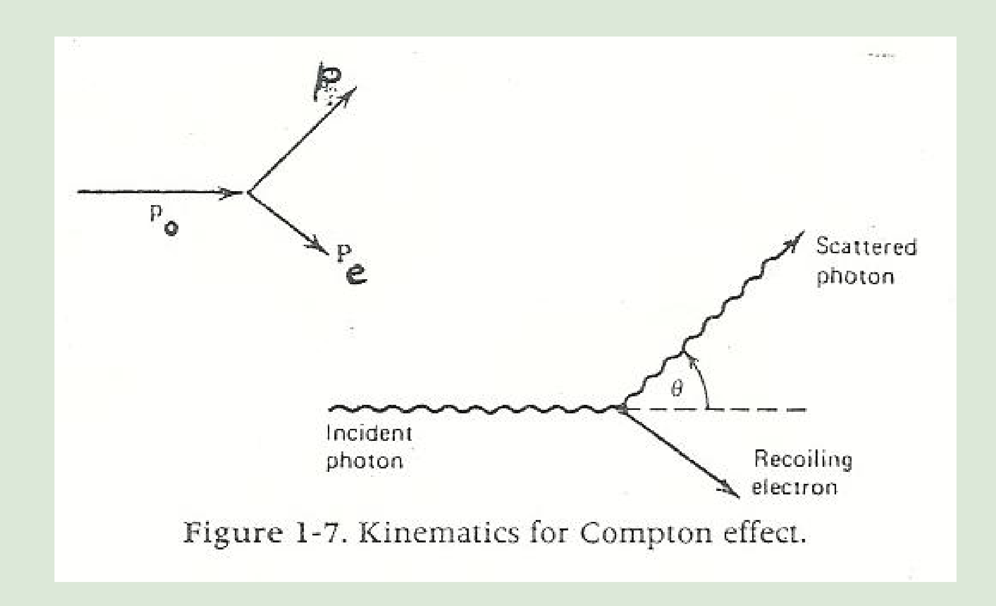


Figure 1-7. Kinematics for Compton effect.

$$\vec{p}^{\,2}_e = \vec{p}_\circ^{\,2} - \vec{p}^{\,2} - 2\vec{p}_\circ \vec{p} \quad (1\text{-}14)$$

نطبق الآن قانون بقاء الطاقة

أولاً، طاقة الإلكترون E قبل التصادم $E = [(m_\circ c^2)^2 + (pc)^2]^{1/2}$

بالتعويض عن $m_\circ = 0$ لأن الإلكترون ساكن قبل التصادم (لأن أن P تساوي صفر).

$$\therefore E = m_\circ c = mc^2 \quad (1\text{-}15)$$

قانون بقاء الطاقة: طاقة الإلكترون والفوتون الساقط قبل التصادم = طاقة الإلكترون والفوتون بعد التصادم

$$h\nu_\circ + mc^2 = h\nu + (m^2 c^4 + p_e^{\,2} c^2)^{1/2}$$

بنقل hv للطرف الأيسر وتربيع طرفي المعادلة

$$(h\nu_\circ + mc^2 - h\nu)^2 = (m^2c^4 + p_e^{\,2}c^2)$$

or

$$m^2c^4 + p_e^{\,2}c^2 = (h\nu_\circ - h\nu + mc^2)^2$$
$$= (h\nu_\circ - h\nu)^2 + 2mc^2(h\nu_\circ - h\nu) + m^2c^4$$

(1-16)

من معادلة (1-14)، بالتعويض عن $p = \frac{h\nu}{c},\ p_\circ = \frac{h\nu_\circ}{c}$

$$\therefore p_e^{\,2} = (\frac{h\nu_\circ}{c})^2 + (\frac{h\nu}{c})^2 - 2(\frac{h\nu_\circ}{c})(\frac{h\nu}{c})\cos\theta$$

حيث θ هي الزاوية المحصورة بين اتجاه الـــشعاع المــشتت و الـــشعاع الساقط. بضرب طرفي المعادلة في C^2

$$p_e^{\,2}c^2 = (h\nu_\circ)^2 + (h\nu)^2 - 2(h\nu_\circ)(h\nu)\cos\theta \qquad (1\text{-}17)$$

وللحصول على مربع كامل، نضيف ونطرح $[2h\nu_\circ h\nu]$ لمعادلة (1-17)

$$p_e^{\,2}c^2 \underbrace{(h\nu_\circ)^2 + (h\nu)^2 - 2h\nu_\circ h\nu}_{(h\nu_\circ - h\nu)^2} + \underbrace{2(h\nu_\circ)(h\nu) - 2(h\nu_\circ)(h\nu)\cos\theta}_{2h\nu_\circ h\nu(1-\cos\theta)}$$

$$\therefore p_e^{\,2}c^2 = (h\nu_\circ - h\nu)^2 + 2h\nu_\circ h\nu(1-\cos\theta) \qquad (1\text{-}18)$$

بالتعويض عن قيمة $(h\nu_\circ - h\nu)^2$ من معادلة (1-18) في معادلة (1-18) نتحـــصل على

$$m^2c^4 + p_e^{\,2}c^2 = p_e^{\,2}c^2 - 2h\nu_\circ h\nu\,(1-\cos\theta) + 2mc^2(h\nu_\circ - h\nu) + m^2c^4$$

(1-19).. بحذف الحدود المتشابهة من طرفي المعادلة:

$$2hv_{\circ}hv(1-\cos\theta)=2mc^{2}(hv_{\circ}-hv)-$$

$$=2mc^{2}h(v_{\circ}-v)$$

$$=2mc^{2}h\left(\frac{c}{\lambda_{\circ}}-\frac{c}{\lambda}\right)2mc^{2}hc\left(\frac{1}{\lambda_{\circ}}-\frac{1}{\lambda}\right)$$

$$2h\frac{c}{\lambda_{\circ}}h\frac{c}{\lambda}(1-\cos\theta)=2mc^{2}h\frac{\lambda-\lambda_{\circ}}{\lambda_{\circ}\lambda}$$

or

$$2h^{2}\frac{c^{2}}{\lambda_{\circ}\lambda}(1-\cos\theta)\,2mc^{3}h\frac{\lambda-\lambda_{\circ}}{\lambda_{\circ}\lambda}$$

$$h(1-\cos\theta)=mc(\lambda-\lambda_{\circ})$$

$$\text{or}\quad \boxed{\lambda-\lambda_{\circ}=\frac{h}{cm}(1-\cos\theta)} \qquad \ldots(1\text{-}20)$$

لاحظ أن $\frac{h}{mc}$ في معادلة (1-20) له بُعد الطول وهذا الحد يُسمى طول موجة كومبتون Compton wavelength للالكترون ومقداره

$$\frac{h}{mc}\cong 2.4\times10^{-10}\,cm \qquad (1\text{-}21)$$

وقد تبين من القياسات المعملية أن طول موجة الفوتون والمتشتت l تتطابق مع القيمة النظرية. أمَّا المركبة الثانية لـ l (انظر شكل والذي يبين مركبتين لـ l إحداهما تختلف عن $l_{\circ}$ والأخرى مساوية لـ $l_{\circ}$) والتي لا تتغير بالنسبة فإن منشأها هو تصادم الفوتون الساقط مع الذرة ككل، فلو عوضنا عن m بكتلة الذرة (بدلاً من كتلة الإلكترون) وحيث أن هذه القيمة في المقام (وهي كبيرة جداً بالنسبة لكتلة الإلكترون) فإن الحد $\frac{h}{mc}$ ستكون قيمته صغيرة جداً قريبة من الصفر، أي أن $\lambda-\lambda_{\circ}\cong o$ وهذا يعني $l\approx l_{\circ}$ وأخيراً ما الذي نستنتجه من تأثير كومبتون؟

إن القياسات التي أجريت على الإلكترون المرتد والفوتون المتبعثر منه تؤكد - بما لا يدع مجالاً للشك – بأن هذا التصادم مماثل للتصادم الذي يحدث

بين كُرتي بلياردو، أي أن الفوتون (أو الشعاع الساقط) يجب أن تتعامل معه على أساس أنه جسيم، وهذا يؤكد الطبيعة الجسيمية للإشعاع.

1-5 الخصائص الموجية للمادة وحيود الإلكترون

1-5 Wave Prosperities and Electron Diffraction

واجه العلماء كثيراً من الصعوبات في وصف طبيعة الضوء. بعض التجارب تبين الطبيعة الموجية للضوء (مثل؟ dispersion الضوء الأبيض لمركبات طيفه عند مروره داخل منشور prism) والبعض الآخر من التجارب يثبت الطبيعة الجسيمية للضوء (مثل التأثير الكهروضوئي)..

وهذا ما يُعرف بالطبيعة المزدوجة للضوء ware- particle duality of lights.

في عام 1924، قدَّم عالم فرنسي يدعى ديبرولي Louis de Broglie – وبناءاً على ما سبق ذكره بالنسبة للضوء- نموذجاً يبين فيه الطبيعة الموجية للمادة؛ فإذا كان الضوء- ذو الطبيعة الموجية – يسلك أحياناً كما لو كان جسيمات، فلماذا لا يكون للمادة طبيعة موجية؟!! وقد صاغ ديبرولي فكرته هذه بصيغة رياضية- اقتبسها من علاقة اينشتاين التي ترتبط بين طول موجة الفوتون l وكمية حركته P [(١)]، فإذا كان جسيم كتلته m وسرعته v فإن كمية حركته $p=mv$ عندئذ فإن الجسيم – وحسب نموذج ديبرولي – سيكون له طول موجي l يعطي بالعلاقة.

$$\lambda \frac{h}{p} \quad ...(1\text{-}22)$$

---

(١) العلاقة التي قدمها اينشتاين للفوتون الذي تردده v وطول موجته l وكمية حركته p

$$\lambda = \frac{c}{v} = \frac{hc}{hv} = \frac{hc}{E} = \frac{h}{(\frac{E}{c})} = \frac{h}{p}$$

حيث h هو ثابت بلانك.

مثال 5:

احسب الطول الموجي لكرة كتلتها 0.14 kg وسرعتها 40 m/s وقارن هذا الطول الموجي مع طول موجة إلكترون سرعته 1.00% من سرعة الضوء؟

الحل:

نوجد أولاً كمية الحركة للكرة

$$p = mco = (0.14 kg)(40 m/s) = 5.6 kg.m.s^{-1}$$

الطول الموجي l حسب معادلة ديبرولي

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63\times10^{-34}\,J.s}{5.6\,kg\,ms^{-1}} = 1.2\times10^{-34}\,m \quad !!!$$

لاحظ أن هذا الطول الموجي متناهي في الصغر

نوجد الآن كمية حركة الإلكترون

$$p = m_e v = (9.1\times10^{-31}\,kg)(2.998\times10^{6}\,ms^{-1})$$

(لاحظ أن السرعة v للإلكترون هي 1% من سرعة الضوء كما هو معطى في السؤال).

$$\therefore p = 2.73\times10^{-24}\,kg.m.s^{-1}$$

طول موجة ديبرولي للإلكترون.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.63\times10^{-34}\,J.s}{2.73\times10^{-24}\,kg.m.s^{-1}} = 2.43\times10^{-10}\,m = 243\,pm$$

(حيث pm يساوي $10^{-12}\,m$).. وهذه القيمة 243 مقارنة للأبعاد الذرية..

من خلال هذه القيم، يتضح لنا أن طول موجة ديبرولي للإلكترون مقاربة لطول موجة الأشعة السينية. وهذا يعني أن الإلكترون سيسلك كما لو كان أشعة سينية!!.

أما بالنسبة للكرة فإن طول موجة ديبرولي لها قصير جداً مقارنة بالأبعاد الذرية...

موجات ديبرولي يمكن مشاهدتها تجريبياً

de Broglie Waves are observed Experimentally

عند اصطدام أشعة X بمادة بلورية فإنه يتشتت بطريقة معينة تعكس طبيعة الترتيب الدوري البلوري للمادة هذه الظاهرة تُعرف بحيود أشعة X. X-ray diffraction وسبب حدوث هذه الظاهرة هو أن الأبعاد البلورية (المسافة بين المستويات البلورية) متقاربة مع الطول الموجي لأشعة X.

ومن الناحية التجريبية، فقد وُجد أن تبعثر شعاع من الإلكترونات بمادة بلورية ينشأ عنه حيود مشابه لحيود أشعة X مما بين- بما لا يدع مجالاً للشك- الطبيعة الموجية للجسيمات.

شكل 1-8 يوضح تشتت موجات نتيجة اصطدامها بتركيب دوري periodic Structure (مثلاً شكل بلوري). ومن الشكل يتضح أنه سيكون فرق في الطور phase difference بين الموجات المنعكسة من مستويات بلورية متجاورة ومقدار فرق الطور $(\frac{2\mathbf{D}}{\lambda})2a\sin\theta$.

وعندما يساوي فرق الطور $2\mathbf{D}n$ (حيث n هو رقم صحيح) فسيتحقق شرط التداخل البَنّاء، أي أن.

$$\frac{2\mathbf{D}}{\lambda}2a\sin\theta = 2\mathbf{D}\,n$$

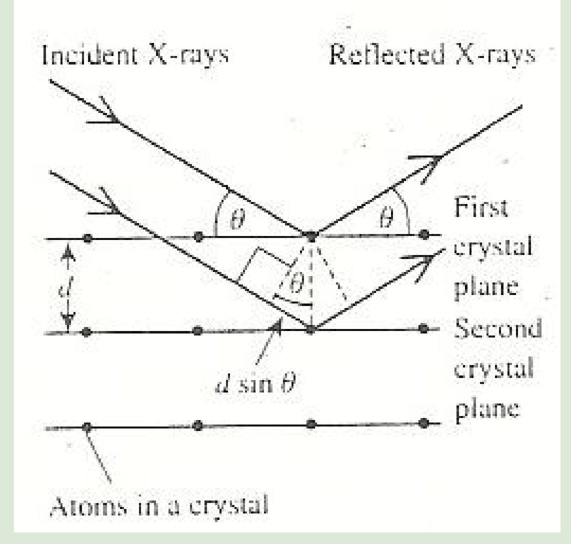


Figure 1-8 the scattering of X-rays by crystal planes when the angle 0 between the scattered X-rays and the crystal plane equals the angle between the incident X-rays and the plane.

$$\lambda = \frac{2a\sin\theta}{n} \quad \dots (1\text{-}23)$$

إن شكل التداخل المشاهد تجريبياً من تشتت الإلكترونات نتيجة اســتدامها ببلورة (كما تحقق على يدي العــالمين دافيــسون و جيرمــر (Davisson and Germer يمكن تفسيره بالمعادلة (1-23) وذلك بشرط أن λ تعطي بالمعادلة (1-22) كما هو موضح في شكل 1-9. إن هذه النتيجة التجريبية ساهمت بخطــوة كبيرة في تطوير علم ميكانيكا الموجات Wave mechanics.

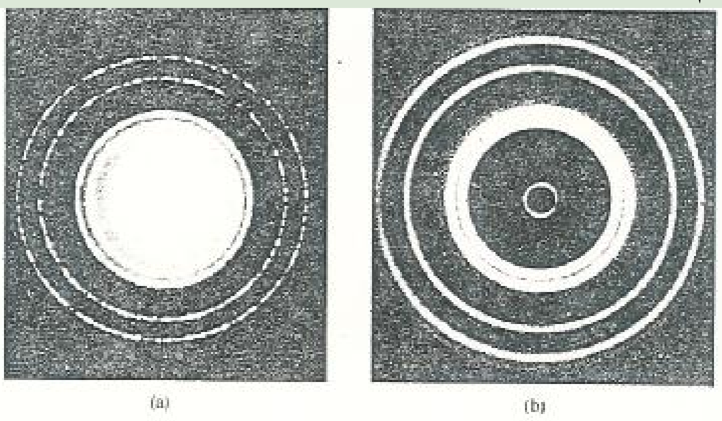


FIGURE 1.9

(a) the X-ray diffraction pattern of aluminum foil. (b) the electron diffraction pattern of aluminum foil. The similarity of these two patterns shows that electrons can behave like X-rays and display wavelike properties.

1-6 ذرة بور

1-6 The Bohr Atom

"The Bohr Theory of the Hydrogen Atom Can be Used Drive the Rydberg For mole"

في عام 1911، قدم العالم الدنماركي نيلس بــور Niels Bohr نظريتــه الشهيرة لذرة الهيدروجين والتي تشرح وتفسر ببساطة الطيــف المنبعــث مــن الذرة.

طبقاً للنموذج النووي للذرة، والذي يقوم على النتائج التجريبية لتطــاير جسيمات α، يمكن اعتبار أن كتلة الذرة متركزة في النواة والتي تعتبــر ثابتــة ويدور حولها إلكترون. القوة F التي يرتبط بها الإلكترون في مدار دائري هــي قوة كولوم حسب قانون كولوم.

$$F=\frac{1}{4\pi\varepsilon_\circ}\frac{(Ze)(e)}{r^2} \qquad \dots (1\text{-}24)$$

حيث (Ze) هي شحنة النواة (لذرة الهيدروجين Z =1) و (e) هي شحنة الإلكترون.

$\varepsilon_\circ = 8.85\times10^{-12}\ c^2\ N^{-1}\ m^{-2}$, r نصف قطر الذرة. تتوازن قوة كولوم مع القوة الطاردة المركزية.

$$F=\frac{mv^2}{r} \qquad \dots (1\text{-}25)$$

حيث v هي السرعة الخطية للإلكترون.

بمساواة القوتان نجد:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_\circ}\frac{e^2}{r^2}=\frac{mv^2}{r} \qquad \dots (1\text{-}26)$$

طبقاً لقوانين الفيزياء الكلاسيكية، فإن الجسم المشحون المتسارع. يُصدر إشعاع مما يؤدي إلى فقدان لطاقته، ولهذا السبب فإن الإلكترون سيفقد طاقته خلال دورانه حول النواة وسيدور في شكل حلزوني ويتلاشى داخل النواة، وعليه فلا يمكن أن يوجد مدار مستقر stable orbit للالكترون. وللخروج من هذا الإشكال اقترح بور فرضياته التي تخالف قوانين الفيزياء التقليدية.

الفرضية الأولى:

المدارات الإلكترونية المستقرة (الثابتة)

Stationary electron orbits

وهذه الفرضية هي تَحدٍ بالمفاهيم التقليدية للفيزياء. ولقد حدد بور هذه المدارات باستحداث شرط التكميم quantization condition وافترض أن كمية الحركة الزاوية angular momentum L مكملة حسب العلاقة.

$$L = mvr = n\mathbf{h} \;,\; n = 1, 2, ...$$

...(1-27)

من هذه العلاقة نجد أن $v = \frac{h\mathbf{h}}{mr}$

بالتعويض في (1-26)

$$\frac{1}{4\mathbf{D}\varepsilon_\circ}\frac{e^2}{r^2} = \frac{m}{r}\left(\frac{n\mathbf{h}}{mr}\right)^2 \; \frac{m\,n^2\mathbf{h}^2}{m^2\,r^3}$$

وفيها نجد أن.

$$\frac{1}{4\mathbf{D}\varepsilon_\circ}\,e^2 = \frac{n^2\,\mathbf{h}^2}{m\,r} \;\Rightarrow\; r = \frac{4\mathbf{D}\,\varepsilon_\circ\,\mathbf{h}^2}{me^2}.n^2 \qquad ...(1\text{-}28)$$

ومن هذه العلاقة نجد أن أنصاف أقطار المدارات لها مقادير محددة أو مكممة. إن أقل نصف قطر للإلكترون يوجد بالتعويض عن n = 1.

$$r=\frac{(u\mathbf{D})(8.85\times10^{-12}c^{2}N^{-1}m^{-2})(1.055\times10^{-34}J.s)^{2}}{(9.11\times10^{-31}kg)(1.602\times10^{-19}c)^{2}}$$

$$=5.29\times10^{-11}\ m=52.9\ pm\approx0.53\ \overset{\circ}{A}$$

وهذه القيمة يرمز لها عادة بـــ $a_{\circ}$

الطاقة الكلية للإلكترون E هي عبارة عن مجموع طـــاقتي الحركـــة k.E والتي تساوي $\frac{1}{2}mv^{2}$ وطاقة الوضع V(r) وصيغتها.

$$V(r)=-\frac{e^{2}}{4\mathbf{D}\varepsilon_{\circ}}\frac{1}{r}\quad ...(1\text{-}29)$$

الإشارة السالبة في (1-29) تعني أن البروتون والإلكترون يجـــذب كـــل منهما الآخر.

لاحظ أن طاقة التجاذب بين البروتون والإلكترون تقل كلما زادت المسافة بينهما وعند $r=\infty$ فإن $V(\infty)=0$

$$E=KE+V(r)=\frac{1}{2}mv^{2}+(-\frac{e^{2}}{4\mathbf{D}\varepsilon_{\circ}}\frac{1}{r})\quad ...(1\text{-}30)$$

من العلاقة (1-26) $\left[\frac{1}{4\mathbf{D}\varepsilon_{\circ}}\frac{e^{2}}{r^{2}}=\frac{mv^{2}}{r}\right]$ يمكن كتابة mv^{2} بالصيغة $mv^{2}=\frac{1}{4\mathbf{D}\varepsilon_{\circ}}\frac{e^{2}}{r}$

بالتعويض في (1-30)

$$\therefore E=\frac{1}{2}(\frac{1}{4\mathbf{D}\varepsilon_{\circ}}\frac{e^{2}}{r})-\frac{1}{4\mathbf{D}\varepsilon_{\circ}}\frac{e^{2}}{r}$$

$$=-\frac{1}{2}\frac{1}{4\mathbf{D}\varepsilon_{\circ}}\frac{e^{2}}{r}=-\frac{1}{8\mathbf{D}\varepsilon_{\circ}}\frac{e^{2}}{r}\quad ......(1-3)$$

بالتعويض عن r من (1-28) في (1-31) نجد:

$$\mathbf{h}=\frac{h}{2\mathbf{D}}$$

$$E=-\frac{1}{8\mathbf{D}\varepsilon_{\circ}}\frac{e^{2}}{\frac{4\mathbf{D}\varepsilon_{\circ}\mathbf{h}^{2}}{me^{2}}n^{2}}=-\frac{me^{4}}{32\mathbf{D}^{2}\varepsilon_{\circ}^{2}\mathbf{h}^{2}}\frac{1}{n^{2}}$$

الاختصار $\mathbf{h}=\frac{h}{2\mathbf{h}}$

$$E=-\frac{me^4}{(32)\mathbf{D}^2\varepsilon_\circ^2\frac{h^2}{4\mathbf{D}^2}}\frac{1}{n^2}$$

$$\therefore E_n=-\frac{me^4}{8\varepsilon_\circ^2\mathbf{h}^2}\frac{1}{n^2} \qquad n=1,2,............$$

...(1-32)

الإشارة السالبة في هذه المعادلة تدل على أن حالات الطاقة حالات مقيدة bound states.

لاحظ أن في حالة n = 1 فإن معادلة (1- 32) تعطينا الحالة ذات أقل طاقة state of lowest energy وتسمى هذه الطاقة بالطاقة الأرضية أو طاقة الحالة الأرضية ground-state energy. أما حالات الطاقة الأعلى تسمى الحالات المستثارة excited states وعادة ما تكون غير مستقرة بالنسبة للحالة الأرضية، وعندما تكون الذرة (أو الجزيء) في الحالة المستثارة فإنها تسترخي وترجع للحالة الأرضية وتعطي أو تتخلص من طاقتها في صورة موجات كهرومغناطيسية كما هو موضح في الشكل (1-10).

الفرضية الثانية: يمكن للالكترونات أن تنتقل (أو تقفز) من مداراتها بطريقة غير متصلة discontinuous transitions وأن التغير في الطاقة ΔE يؤدي لانبعاث إشعاع له تردد $h\nu$. ولهذا السبب لو انتقل إلكترون من المدار الذي له $n_2 = 1$ إلى المدار ذو $n_1 = 2$ فإن الفرق في الطاقة.

$$\Delta E=E_2-E_1=-\frac{me^4}{8\varepsilon_\circ^2h^2}\frac{1}{n_2^2}-\left(-\frac{me^4}{8\varepsilon_\circ^2h^2}\frac{1}{n_1^2}\right)$$

$$\Delta E=\frac{me^4}{8\varepsilon_\circ^2h^2}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)=h\nu \qquad ....(1-33)$$

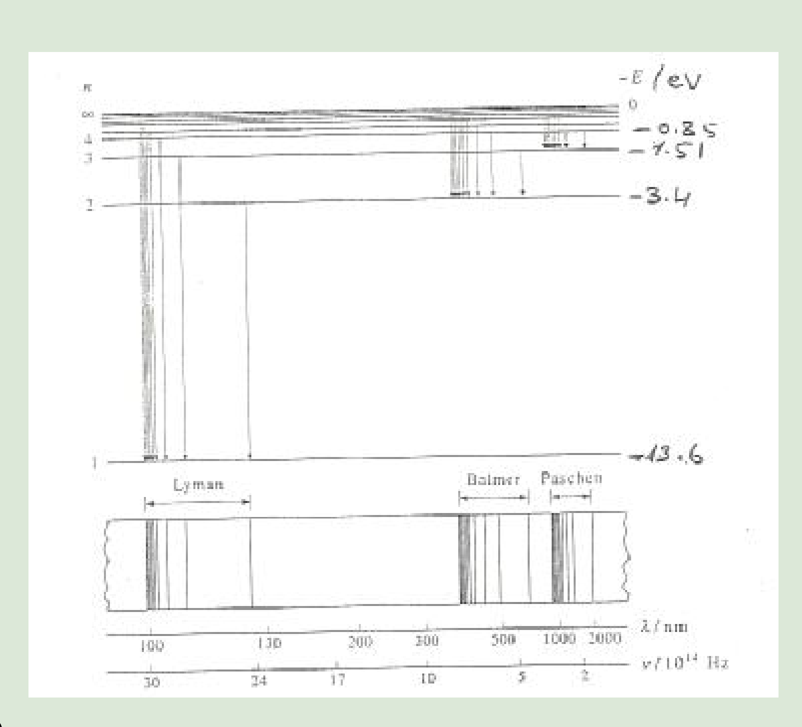


FIGURE 1.10

The energy level diagram for the hydrogen atom, showing how transitions from higher states into some particular state lead to the observed spectral series for hydrogen.

من معادلة (33-1) يمكننا الحصول على الصيغة الرياضية للعلاقة العددية المعروفة بمعادلة ريدبرج والتي تصف جميع خطوط الطيف لذرة الهيدروجين.

بالتعويض عن hv بـــ $\frac{hc}{\lambda}$ في (33-1) نجد.

$$\frac{hc}{\lambda}=\frac{me^4}{8\varepsilon_\circ^2h^2}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$$

وفيها نجد $\frac{1}{\lambda}$

$$\frac{1}{\lambda}=\frac{me^4}{8\varepsilon_\circ^2h^3c}\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)$$

$$\frac{1}{\lambda}=R_H\left(\frac{1}{n_1^2}-\frac{1}{n_2^2}\right)\ldots\ldots\ldots\ldots(1-34)$$

حيث R_H هو ثابت ريدبرج Rydberg constant

$$R_H = \frac{me^4}{8\varepsilon_\circ^2 h^3 c} = \frac{(9.11\times10^{-31}\,kg)(1.60\times10^{-19}\,c)^4}{(8)(8.85\times10^{-12}\,c^2N^{-1}m^{-2})(6.63\times10^{-34}\,J.s)^3(2.0\times10^8\,m/s)}$$

$$R_H^{(1)} = 1.089\times10^7\,m^{-1}$$

بالنظر لخطوط الطيف في شكل 10-1 يمكن أن نلاحظ التوافق بين نموذج بور وهذه الخطوط المتفقة مع النتائج التجريبية. فمثلاً خطوط سلسلة ليمان Lyman تنشأ من رجوع (استرخاء) الإلكترونات المستثارة من المستويات العليا للمدار الأول ($n = 1$)، وكذلك خطوط سلسلة بالمر Balmer series تحدث من استرخاء الإلكترونات المستثارة من كل المستويات العليا للمستوى الثاني ($n=2$).

مثال 6

احسب طاقة التأين لذرة الهيدروجين؟

Calculate the ionization energy of the hydrogen atom?

الحل:

طاقة التأين هي الطاقة اللازمة لإزالة الإلكترون من مستوى الحالة الأرضية $n_1 = 1$ إلى الحالة غير المقيدة أي $n_2 = \infty$

$$\Delta E = \frac{me^4}{8\varepsilon_\circ^2 h^2}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

$$= \frac{(9.1\times10^{-34}\,kg)\,(1.9\times10^{-19}\,c)^4}{(8)\,(8.85\times10^{-12}\,c^2N^{-1}m^{-2})(6.63\times10^{-34}\,J.s)^2}\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{\infty^2}\right)$$

$$= 2.18\times10^{-18}\,J = 13.6\ eV$$

في عام 1925، ظهرت النظرية الحديثة لميكانيكا الكم وذلك بناءاً على الأبحاث التي رسخ دعائمها كل من العالم هيزنبرج Heisenberg .W والعالم

(2) The exact value of $R_H = 1.09736 \times 10^7\ m^{-1} = 109.736\ cm^{-1}$

ماكس بورن M. Born، والعالم شـــرودنجر E. Shrödinger والعـــالم ديـــراك P. Dirac.

وتشرح النظرية الكمية الحديثة المفاهيم المحيرة بشرط أن نتخلـــى عــن بعض المفاهيم التي ترسخت في أذهاننا من علم الفيزياء التقليدية!.

Q1) إذا علمت أن كثافة الإشعاع تعطى بالمعادلة $u(\nu,T)=\frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{h\nu/KT}-1}$

(a) احسب كثافة الطاقة في مدى طول موجي $\Delta\lambda$، أي $u(\lambda,T)d\lambda$؟

(b) استخدم النتيجة في جزء (a) لإيجاد قيمة $l = l_{max}$ والتي عندها تكون كثافة الإشعاع أقصى ما يمكن؟

(c) وضح أن λ_{max} يمكننا كتابتها على الصيغة $\lambda_{max}\frac{b}{T}$، واحسب قيمـــة b فـــي حالة سطح الشمس علماً بأن درجة حرارة سطح الشمس تساوي 5620k؟

(تنبيه: حل المعادلة $s-x = se^{-x}$ بالرسم البياني).

(d) ينبعث من أشد النجوم حرارة (نجم الشّعري Sirius) طيف إشعاع الجـــسم الأسود والذي له $\lambda_{max} = 260nm$. احسب درجة حرارة سطح هذا النجم؟

(e) إذا علمت أن متوسط درجة حرارة سطح الأرض 288 k. اسحب الطـــول الموجي لأقصى كثافة إشعاع للجسم الأسود للأرض. حدد لأي جزئ مـــن الطيف يقابل هذا الطول الموجي؟

Q2) أقصى طاقة حركية لإلكترونات منبعثة من سطح ألومنيوم تساوي 2.3 eV وذلك عند تعرض هذا السطح لأشعة ذات طول موجي 2000Å. أما عنـــد تعرض السطح لأشعة طولها الموجي 2580 Å فـــإن الطاقـــة الحركيـــة للإلكترونات المنبعثة تساوي 0.9 eV. احسب قيمة ثابـــت بلانـــك ودالـــة الشغل للألمونيوم؟

Q3) احسب (a) الطول الموجي والطاقة الحركية لإلكترون مُعَجّل تحت تـأثير فرق جهد V 100 و (b) طاقة الحركة الإلكترون له طول موجي ديبرولي 200 pm (حيث $1\ pm = 10^{-12}\ m$)؟

Q4) أشعة X استطارت بإلكترون ساكن. احسب طاقة أشـعة X الـساقطة إذا علمت أن طول موجة الأشعة المستطارة عند زاوية 60° تساوي $0.035\,\mathring{A}$؟

Q5) المسافة بين مستويين متجاورين من المستويات البلوريـة يـراد قياسـها باستخدام أشعة X طولها الموجي 0.5 Å والتي تم قياسها عند زاويـة 5°. احسب قيمة المسافة بين هذين المستويين؟ عند أي زاوية يمكننـا قيـاس القيمة الثانية؟

إجابات الأسئلة: الإجابة الأخيرة من كل سؤال:

Q1) (a) $u(\lambda,T)=\frac{8Dhc}{\lambda s}(e^{hc/\lambda c/}-T)^{-1}$

(b) المطلوب إثبات القانون $\lambda_{max}=b/T$ نظري

(c) $\lambda_{mex}=5160\,\mathring{A}$

(d) $T=1.12\times10^{4}k_1$

(e) $\lambda=1.01\times10^{-5}m$

(Q2) $W=3.92\ eV$

(Q3) $K.E=6.02\times10^{-18}\ J$

(Q4) $E=5.4\times10^{5}\ eV$

(Q5) $\theta=10^\circ$

الحزم الموجية وعلاقات اللاتحديد

WAVE PACKETS AND THE UNCERTAINTY RELATIONS

إن علم ميكانيكا الكم يزودنا بفهم صحيح لكل الظواهر الفيزيائية التي تم مناقشتها في الفصل الأول. وهذا العلم ضروري لفهم سلوك الذرات، الجزيئات، أنوية الذرات وتجمعات من هذه وتلك. وعادة ما تتم الدراسة باستخدام معادلة شرودنجر Shrodinger equation والتأويلات الصحيحة لحلولها. وهذه المعادلة لا يوجد لها إثبات! ولكن استطاع شرودنجر التوصل إليها عن طريق إتباع توجيهات (أو فراسات insight) العالم الفرنسي ديبرولي. ومن الجدير بالذكر أن هذه المعادلة توجد خارج نطاق الفيزياء التقليدية، الأمر الذي يجعل استنباطها صعب. وخلال المناقشة في هذا الفصل سنحاول التوفيق بين الخواص الجسيمية والموجية للالكترونات.

إنه من الصعب تخيل الإلكترونات على أساس أن لها سلوك الموجات ولكن تجارب الحيود التي أجراها كل من Young and Freshet أدّت إلى الإجماع (أو اتحاد الآراء) بقبول النظرية الموجية للضوء. ومن جانب آخر بالإمكان أن نتصور تجمعات (أو هيئات) للموجات المحصورة أو المتحيزة (أو المتمركزة جداً) Very localized فعلى سبيل المثال تعتبر قرقعة الرعد a clap of thunder مثال لتداخل الموجات وتراكبها مما يؤدي إلى تأثير متمركز مع الزمن localized in time. مثل هذه الحُزم الموجية المتمركزة localized "wane packets" يمكن الحصول عليها عن طريق تراكب الموجات superposing waves بترددات مختلفة بحيث يتم تداخل كل موجة مع الأخرى خارج منطقة مكانية.

They interfere with each other almost completely outside of a given spatial region.

والطريقة التي يمكن إتباعها (أو الأدوات الرياضية المستخدمة) هي عمل تكاملات فورير Fourier integrals.

وقبل البدء في المعالجة الرياضية للحزم الموجية، لعله من المفيد مراجعة بعض أساسيات الدوال المركبة وتكاملات فورير وكيفية إيجاد عرض الـــدوال وكذلك مراجعة بعض التكاملات.

يمكن كتابة أي رقم مركب z بالصيغة.

$$z = x + i\,y \qquad ......(A:2-1)$$

حيث x تمثل الجزء الحقيقي لـــ z أي $Re(z)$ و y تمثل الجزء التخيلي Im z الوحدة التخيلية I وهي:

$$i = \sqrt{-1} \;\Rightarrow i^2 = -1 \qquad (A:2-2)$$

لقسمة دوال تخيلية (أو أرقام تخيلية) يحسن بنا استحداث المرافق المركب complex conjugate ويرمز له z* حيث:

$$z^* = v - iy \qquad (A:2-3)$$

لاحظ أننا استبدلنا i ب i– الرقم التخيلي مضروب في مرافقه أي zz* يعطينا

$$zz^* = (x+iy)(x-iy) = x^2 - i^2 y^2 = x^2 + y^2 \qquad ....(A:2-4)$$

لاحظ أن $z z^*$ تساوي مربع القيمة المطلقة $|z|^2$

والآن لإيجاد القيمة الحقيقية والتخيلية لـــ $\frac{1}{z} = \frac{1}{x+iy}$

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{x+iy}\,\frac{x-iy}{x-iy} = \frac{x-iy}{x^2+y^2} = \frac{x}{x^2+y^2} - i\frac{y}{x^2+y^2}$$
$$\Rightarrow Re(\frac{1}{z}) = \frac{x}{x^2+y^2} \text{ and } In(\frac{1}{z}) = \frac{y}{x^2+y^2}$$

من المفيد كتابة z بدلالة θ, r باستخدام معادلة Euler

$$e^{i\theta}=\cos\theta+i\sin\theta \qquad (A:1-5)$$
$$x=r\cos\theta \text{ and } y=r\sin\theta$$
$$\Rightarrow z=x+iy=r\cos\theta+ir\sin\theta=r(\cos\theta+i\sin\theta)=re^{i\theta}$$

لاحظ أن المرافق لـــ $e^{i\theta}$ هو $e^{i\theta}.e^{-i\theta}=e^{\circ}=1\Leftarrow e^{-i\theta}$

وكذلك $z^{*}=re^{-i\theta}$

ومنها نجد $zz^{*}=(re^{-i\theta})(re^{-i\theta})=r^{2}$

ومن المفيد تذكر أن

$$\cos\theta=\frac{e^{i\theta}+e^{-i\theta}}{2} \qquad (A:2-6)$$
and
$$\sin\theta=\frac{e^{i\theta}-e^{-i\theta}}{2i} \qquad ....(A:2-7)$$

إذا كانت لدينا دالة $j(\theta)$ $\quad j(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2D}}e^{im\theta}$

حيث $m=0\ \pm1\ \pm2......$ و حدود θ هي $0\le\theta\le 2D$

فإن:

$$\int_{\circ}^{2D}d\theta\, j(\theta)=\int_{\circ}^{2D}d\theta\frac{1}{\sqrt{2D}}e^{im\theta}=\frac{1}{\sqrt{2D}}\left[\frac{e^{im\theta}}{im}\right]_{\circ}^{2D}$$
let $m\neq o$
$$=\frac{1}{\sqrt{2D}}\frac{1}{im}\left[e^{i2Dm}-e^{\circ}\right]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2D}}\frac{1}{im}\left[\underbrace{\cos 2Dm}_{1}+i\underbrace{\sin 2Dm}_{0}-1\right]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2D}}\frac{1}{im}[1-1]=0$$

let $m=0$
$$\int_{\circ}^{2D}d\theta\, j(\theta)=\int_{\circ}^{2D}d\theta\frac{1}{\sqrt{2D}}e^{i(0)\theta}=\frac{1}{\sqrt{2D}}\int_{\circ}^{2D}d\theta=\frac{1}{\sqrt{2D}}[\theta]_{\circ}^{2D}$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2D}}.(2D-0)=\frac{2D}{\sqrt{2D}}=\sqrt{2D}$$

يمكن إجراء التكامل الأول بصورة أسهل كالتالي:

$$\int_{0}^{2D}\frac{1}{\sqrt{2D}}e^{im\theta}\,d\theta=\int_{0}^{2D}\frac{1}{\sqrt{2D}}\cos m\theta\,d\theta+\int_{0}^{2D}\frac{i}{\sqrt{2D}}\sin m\theta\,d\theta=0$$

كل حد من التكامل يساوي صفر لأننا نجري حدود التكامـــل عبـــر دورة كاملة ونرجع لنفس البداية ولهذا نستخلص أنه إذا كانت $m = 0$ فـــإن التكامـــل يساوي $\sqrt{2D}$ أما للقيم الأخرى لـــ m فإن التكامل يساوي صفر ويمكن صـــياغة النتيجة بهذه الصورة.

$$\int_{0}^{2D}d\theta\, j\,(\theta)=0 \qquad \text{for all values of } m\neq 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(A:2\text{-}8)$$

$$=\sqrt{2D} \qquad \text{for } m=0 \qquad (A:2\text{-}9)$$

وبنفس الطريقة يمكننا استنتاج العلاقة

$$\int_{0}^{2D}d\theta\, j_m^{*}(\theta)\, j_n(\theta)=0 \qquad m\neq n \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(A:2\text{-}10)$$

$$=1 \qquad m=n \qquad (A:2\text{-}11)$$

$$\int_{0}^{2D}d\theta\frac{1}{\sqrt{2D}}e^{-im\theta}\cdot\frac{1}{\sqrt{2D}}e^{in\theta}$$

$$\text{Now, Let} \quad m=n\Rightarrow\frac{1}{2D}\int_{0}^{2D}d\theta\, e^{i(n-m)\theta}=\frac{1}{2D}\int_{0}^{2D}d\theta\, e^{0}=\frac{1}{2D}[\theta]_{0}^{2D}$$

$$=\frac{1}{2D}(2D-0)=1$$

$$\text{Let } m\neq n\Rightarrow\frac{1}{2D}\int_{0}^{2D}d\theta\, e^{i(n-m)\theta}$$

$$=\frac{1}{2D}\int_{0}^{2D}d\theta\left[\cos(n-m)\theta+i\sin(n-m)\theta\right]$$

قيمة هذا التكامل تساوي صفر وذلك لأن التكامل يجري على دورة كاملة للدالة (أي أنه يبدأ ثم ينتهي عند نفس القيمة).

ومن الدوال المركبة المهمة: $\sin h\,x$ و $\cos h\,x$ وتعرف بـــ

$$\sin h\,x=\frac{e^{x}-e^{-x}}{2} \Rightarrow \sin h\,i\,x=i\sin x \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(A:2\text{-}12)$$

$$\cos h\,x\ \frac{e^{x}+e^{-x}}{2}\Rightarrow\cos h\,i\,x=\cos x \qquad (A:2\text{-}13)$$

نبذة مختصرة عن تحليلات فورير وتكاملاته

Short Introduction about Fourier Series and its integral.

إن أي دالة لها صورة موجية أو تكرر نفسها بدورة معينة، مثل الدوال الموجية الموضحة في شكل A:2.1، يمكن وصفها رياضياً باستخدام مبدأ التراكب Principle of super position، أي يمكن التعبير عنها عن طريق جمع (أو تراكب) موجات تكتب رياضياً بدلالة الـ: جا sin والـ جتا cos. هذه الطريقة الرياضية تُعرف بتحليل فورير Fourier analysis نسبة للعالم فورير. وتعتمد هذه الطريقة على أساس أنها يمكن صياغة أي دالة $f(x)$ (حيث x يمكن أن تمثل الموقع أو الزمن) يمكن أن تكتب في صورة متسلسلة من دوال دورية (تعرف بسلسلة فورير) Fourier series.

$$f(x)=\frac{1}{2}a_\circ+a_1\cos x+a_2\cos 2x+.....+a_n\cos nx+b_1\sin x+b_2\sin 2x+.....+b_n\sin nx+........$$
$$=\frac{1}{2}a_\circ+\sum_{n=1}^{\infty}a_u\cos nx+\sum_{n=1}^{\infty}b_n\sin vx\,.............(A:2-14)$$

تتكون هذه المتسلسلة من حد ثابت $\frac{1}{2}a_\circ$ بالإضافة إلى حدود من الجيب وجيوب التمام sine and cosine terms) لها سعات مختلفة $a_1, a_2, ...$ $b_1, b_2, ...$ Different amplitudes. ترددات الجا والجتا في كل حد من الحدود عبارة عن harmonics و مضروبات multiples التردد الأساسي x.

Fundamental frequency x. للتعبير عن معينة من خلال تحليل فورير فإن المعاملات $a_1, a_2, ...$ و $b_1, b_2, ...$ يلزم تحديدها وذلك بتكامل الدالة f(x) خلال دورة كاملة أي من صفر إلى **2D** كما يلي:

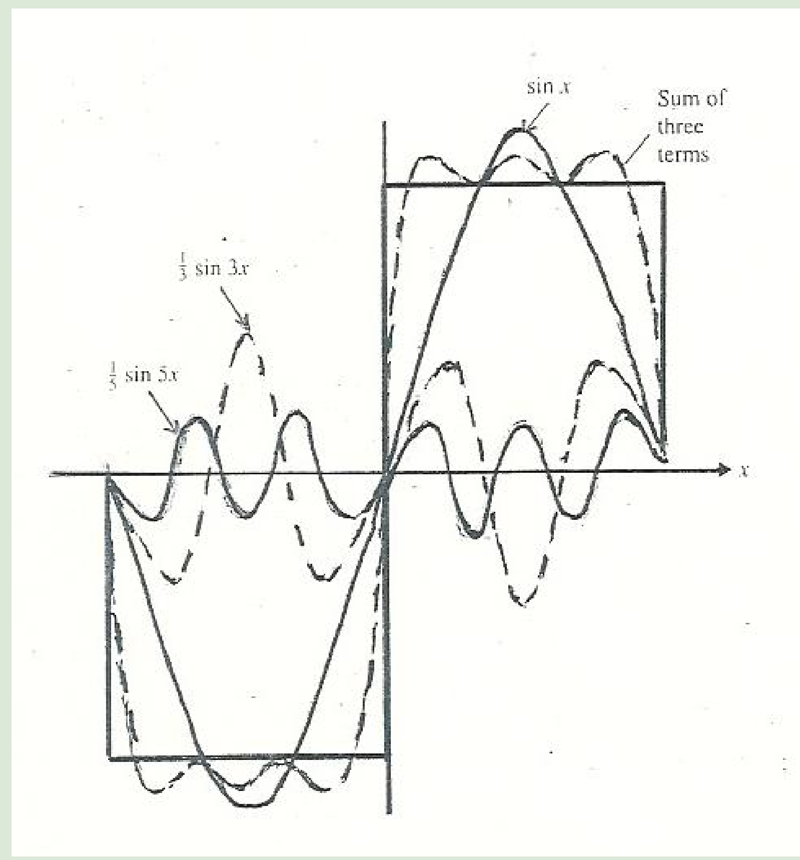
$$a_n=\frac{1}{D}\int_\circ^{2D}f(x)\cos nx\,dx \qquad , \qquad b_n=\frac{1}{D}\int_\circ^{2D}f(x)\sin nx\,dx\,..................(A:2-15)$$

الشكل يوضح أن توليد دالة موجية مربعة:

يتم عن طريق تداخل (أو تراكب) ثلاث موجات جيبية هي $\frac{1}{2}\sin 2x\ ,\frac{1}{3}\sin 3x, \sin x$ أول الحدود في متسلسلة فورير $\frac{1}{2}a_{\circ}$ يمكن كتابته (من معادلـــة A: 2-15) بالصورة.

$$\frac{1}{2D}\int_{\circ}^{2D} f(x)\,dx$$

وهذه المعادلة تمثل ببساطة متوسط الدالة f(x) عبر الفترة $2D$.



تحليل فورير والحُزَم الموجية:

يمكن الاستفادة من تحليل فورير لتمثيل الحزم الموجيـــة Wave packets وهي عبارة عن نبضات موجية Wave pulses عند دراسة الحركـــة الموجيـــة لنتحصل على نبضة موجية يلزم تراكب موجات جيبية على مدى متصل مـــن الأرقام الموجية k في مدى قدرته Δk. يمكننا فهم كيفية تكون حزمة موجيـــة،

على سبيل المثال، خذ تراكب عدد سبعة من الموجات الجيبية التي لكــل منهــا الصيغة الرياضية.

$$y = A_k \cos(kx - \omega t) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(A:2-16)$$

وعنـــد $t = 0$، الأرقـــام الموجيـــة (Wave umbers) k تـــساوي 27 , 30 ,33 ,36 ,39 ,42 ,45 وكل من هذه الأرقام يقابلها ســعة A_k تــساوي 0. 25 , 0.33 , 0.5 , 1.0, 0.5 , 0.33 , 0.25 شكل A: 2-3 يوضح تغير السعة A_k مع k وهي ما يسمى بطيف الرقم الموجي Wave umber spectrum.

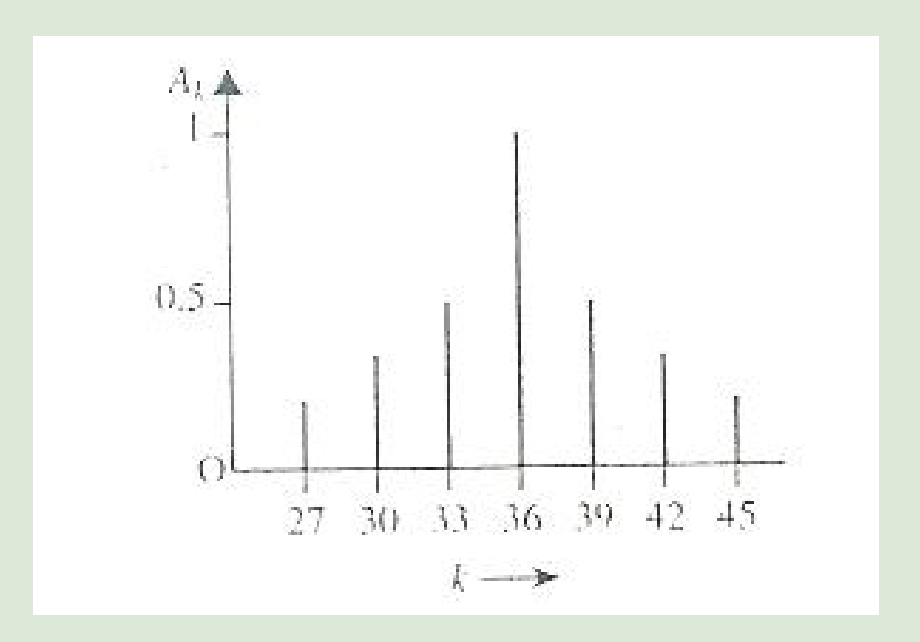
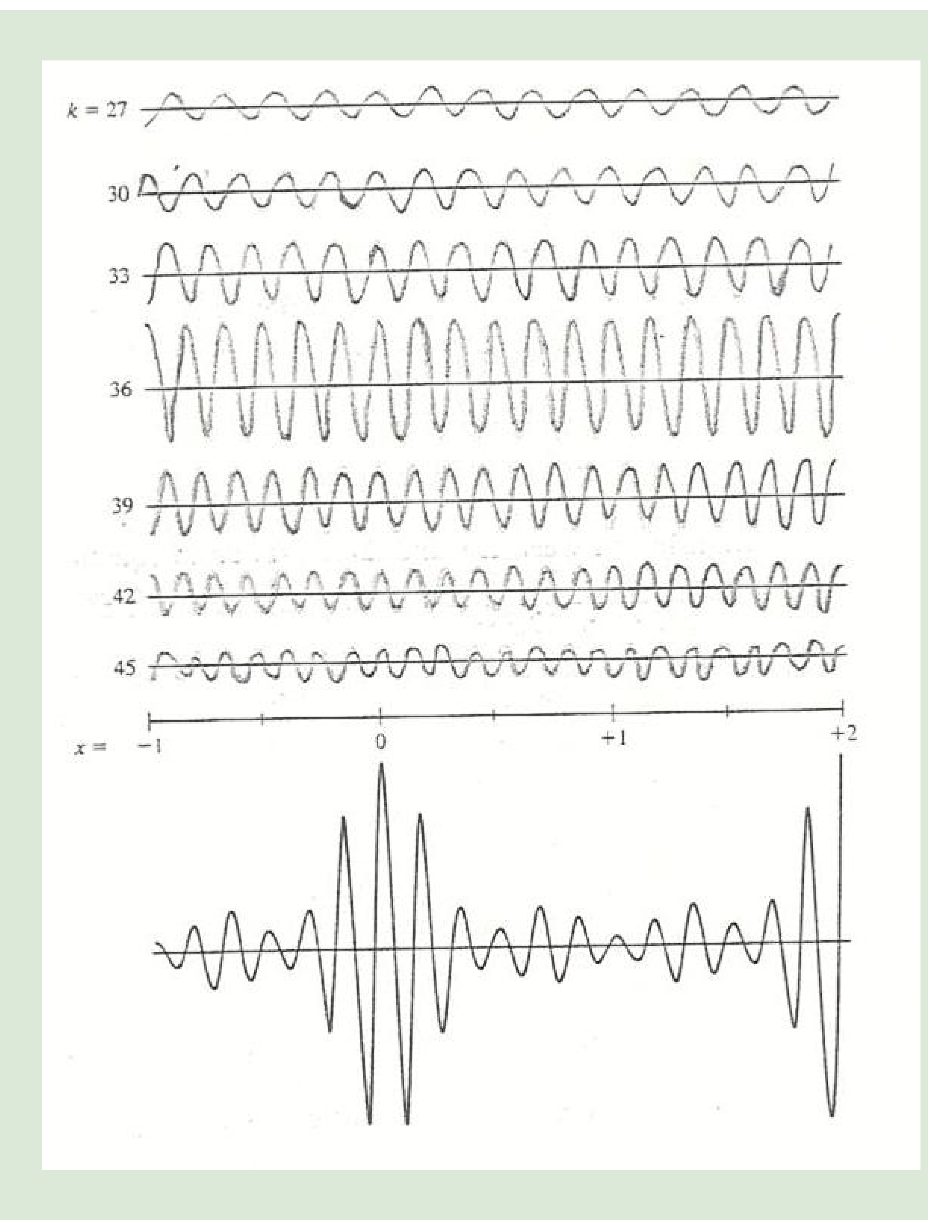


Figure A:2-3 the frequency spectrum used to generate the we packet shown in Figure 12.84.

الشكل الموجي لكل موجة من الموجات السبعة وحاصــل تراكبهــا (أو محصلة تراكبها) موضحة في شكل (A: 2-4).



شكل (A: 2-4) كيفية تؤكد حزمة موجية (أسفل الشكل) من تداخل ســبعة موجات كالموضحة في أعلى الحزمة الموجية.

أما في حالة تراكب عدد كبير جداً من الموجات بحيث يمتد تغير الأرقام الموجية عبر عرض قدره ΔK سنتحصل على حزمة موجية واحدة كمــا هــو موضح في الشكل A: 2-5.

لاحظ أن عرض الحزمة الموجية ΔK......

ويمكن أن نلاحظ نقطة هامة جداً وهي أنه كلما ازدادت ΔK فإن عرض الحزمة ΔK يقل. وهذه النتيجة هامة لأنها الأساس الذي يبنى عليه مبدأ اللاتحديد في علم ميكانيكا الكم.

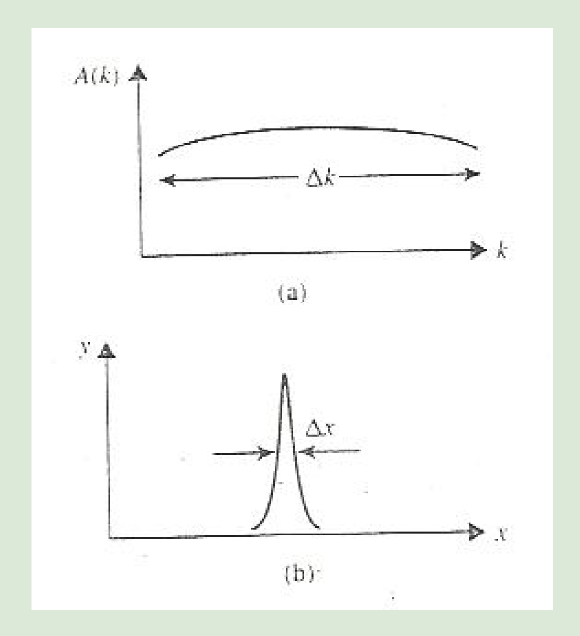


Figure A: 2-5 (a) the wave number spectrum and (b) the wave packet. Produced when Δk the wave number spread shown in Figure A:2-4 becomes broader.

إن تراكب عدد لانهائي infinite number من الموجات يمكن صـــياغته رياضياً بتكامل فورير Fourier integral بدلاً من متسلسلة فورير. وهكذا، فعند زمن ثابت، فإن مجموعة من الموجات تعطي بـــ:

$$y(x) \int_{o}^{\infty} A(k) \cos k\,x\,dk \qquad \ldots\ldots\ldots(A:2-17)$$

حيث A(k) هي السعة والتي تتغير مع k. وسنناقش في هذا الفصل بعـــد هذه المقدمة، كيف يمكننا، باستخدام تكاملات فـــورير، أن نوضـــح أن $\Delta x, \Delta k$ مرتبطتان بالدالة.

$$(\Delta x)(\Delta k) = \text{constant} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(A:2-18)$$

ولعله من المفيد صياغة المعادلة (A: 2-17) للحزمة الموجية بدلالة الدالة المركبة على الصورة العامة.

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2D}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, A(k)e^{ikx} \qquad ....(A:2-19)$$

وإذا أدخلنا الزمن كمتغير لدراسة تأثير الزمن علـــى انتـــشار الحزمـــة الموجية يمكن صياغة المعادلة (A:2-19) بالصورة.

$$f(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty} dk\, A(k)e^{ikx-\omega(k)t} \qquad ....(A:2-20)$$

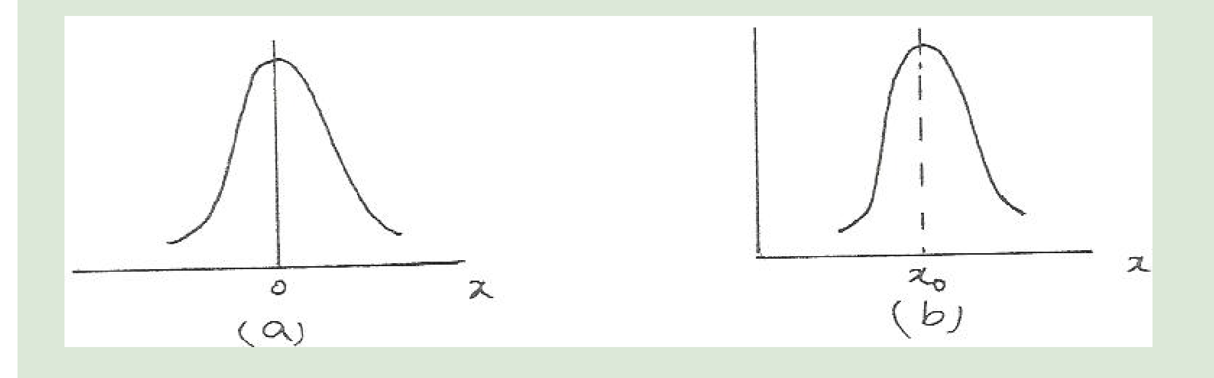
عند تداخل موجات سرعة كل منها v فإن الحزمة الموجية المتكونة تكون سرعتها تمثل سرعة مجموعة من الموجات المكونة للحزمة وتـــسمى بـــسرعة المجموعة group velocity ويرمز لها بــ v_g وتعطى بالعلاقة.

$$v_g=\frac{d\omega}{dk} \qquad ....(A:2-21)$$

كيفية إيجاد عرض دالة:

من النقاط التي تهمنا في هذا الفصل إيجاد عرض دالـــة وذلـــك لأهميـــة الموضوع بمبدأ اللاتحديد في ميكانيكا الكم.

خذ على سبيل المثال الدالة الموضحة في الشكل A: 2-6

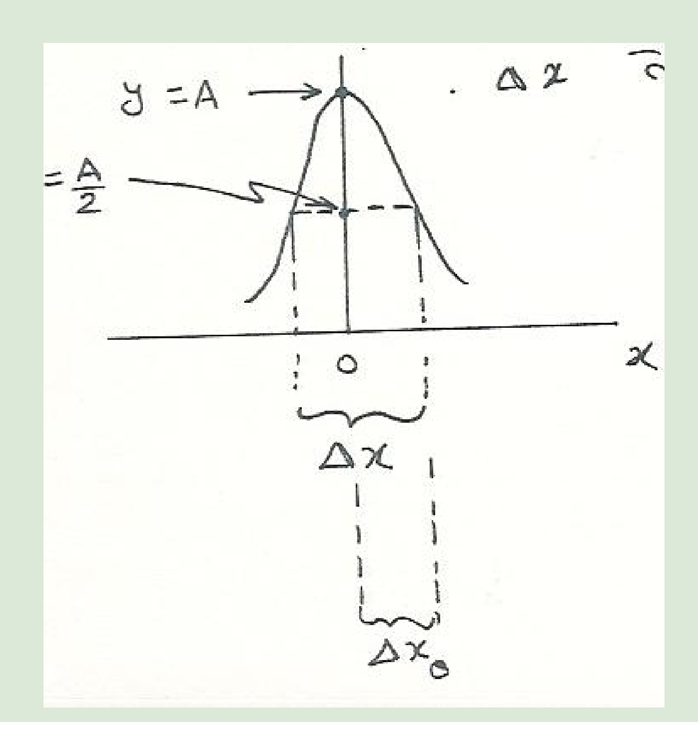


كلتا الدالتان لهما نفس العرض، ولكن إحداهما متماثلة حول $x = o$ والأخـــرى متماثلة حول x_o. الأول في الشكل (a) يمكن كتابتها رياضياً بالصيغة $y = A e^{-\alpha x^2}$ حيث α ثابت ومرتبط بعرض الدالة و A يمثل سعة الدالـــة أي قيمـــة y عندما $x = o$.

إحدى الطرق لإيجاد عرض الدالة أن نأخذ العرض عندما تقل الدالة (أي عندما تقل قيمة y. من أقصى قيمة (عندما $y = A$) إلى أن تـــصل إلـــى $y = \frac{A}{2}$، عندها نأخذ عرض الدالة Δx.

كما هو موضح بالشكل.

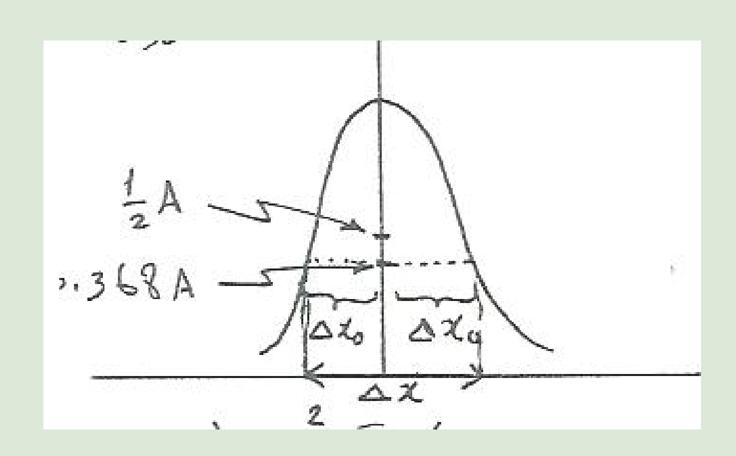
$$\ln y = \ln A - \alpha x^2$$
$$\Rightarrow \alpha x^2 = \ln A - \ln y$$
$$\alpha x^2 = \ln A - \ln \frac{1}{2} A \qquad y = \frac{1}{2} A \quad \text{نعوض عن}$$
$$= \ln \frac{A}{A/2} = \ln 2 = 0.693$$
$$\Rightarrow x^2 = \frac{1}{\alpha} 0.693 \quad \Rightarrow \Delta x_\circ = \sqrt{\frac{0.693}{\alpha}} \quad \Rightarrow \Delta x = 2\sqrt{\frac{0.693}{\alpha}}$$



يمكن إيجاد تعريف آخر لعرض الدالة وهو أسهل من الطريقة السابقة.

نأخذ عرض الدالة عندما تقل قيمة y من القيمة القصوى إلى أن تصل إلى $\frac{1}{e}$ حيث $e = 2.718$ وعليه $\frac{1}{e}=0.368$ أي بدل أن نأخذ العرض عندما تقل y إلى النصف (كما في الطريقة السابقة) نأخذ العرض عندما تقل y إلى 0.368 من قيمتها القصوى.. وسهولة هذه الطريقة من الناحية الرياضية. $y=Ae^{-\alpha x^2}$

خذ مثلاً الدالة السابقة



قيمة y القصوى هي $y = A$ لكي تقل y إلى $\frac{1}{e}$ من قيمتها القصوى، أي ما هي قيمة x^2 التي تجعل الأس (αx^2) يساوي الواحد. عندما يساوي الأس قيمة واحد فإن $y=(\frac{1}{e})A \Leftarrow y=Ae^{-1}$

$$\Rightarrow \alpha x^2=1 \Rightarrow \Delta x_\circ=\frac{1}{\sqrt{\alpha}} \Rightarrow \Delta x=2\Delta x_\circ=\frac{2}{\sqrt{\alpha}}$$

وهذه هي الطريقة التي سنستخدمها لإيجاد عرض الدوال التي لها الصيغة الأسية. وهناك طرق أخرى لإيجاد عرض الدوال الجيبية.

وبعد هذا الاستطراد نعود لمناقشة موضوع هذا الفصل وهو الحزم الموجية وعلاقات اللاتحديد..

خذ على سبيل المثال الدالة $f(x)$ المعرفة بالعلاقة.

$$f(x)=\int_{-\infty}^{\infty} dk\, g(k)\, e^{ikv} \qquad ....(2-1)$$

هذه العلاقة تُعبِّر عن تراكب خطي من موجات ذات طول موجي $\lambda=\frac{2D}{k}$، ولكل قيمة لـــ k فكل موجة تكرر نفسها عندما تتغير x إلى $v+\frac{2D}{k}$.

ولتوضيح طبيعة هذه الحزمة الموجية، دعنا نختار صـــيغة للدالـــة g (k) حيث. $g(k)=e^{-\alpha(k-k_\circ)^2}$

...(2-2)

$$\text{Let } k^1=k-k_\circ$$
$$\Rightarrow k=k^1+k_\circ$$
$$\Rightarrow dk=dk^1$$
$$\Rightarrow g(k)\to g(k^1)=e^{-\alpha k^{12}} \text{ and } e^{ikv}=e^{i(u^1+k_\circ)v}$$

بعد هذه التعويضات يمكن كتابة (2-1) بالصيغة

$$\Rightarrow f(x)=\int_{-\infty}^{\infty} dk^1\, e^{-\alpha k^{12}}\,.e^{i(k^1+k_\circ)v}$$
$$=\int_{-\infty}^{\infty} dk^1\, e^{-\alpha k^{12}}\, e^{ik^1v}.\underbrace{e^{ik_\circ v}}_{\text{ثابت}}$$
$$=e^{ikov}\int_{-\infty}^{\infty} dk^1\, e^{-\alpha k^{12}}\, e^{ik^1v}$$

لحساب قيمة التكامل يجب تحوير صيغته الرياضية للـــصورة $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ak^{-2}}\, dk^1$ وذلك لأن قيمة التكامل $\int_{\circ}^{\infty} e^{-\alpha k^{12}} dk^1=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{D}{\alpha}} \qquad ....(2-3)$

وللوصول لهذه الصورة يلزم أن نجعل الأس مربع كامل حسب الخطوات التالية.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk^1 e^{-\alpha k^{12}}.e^{ik^1v}=\int_{-\infty}^{\infty} dk^1\, e^{-\alpha k^{12}+ik^{iv}}$$

خذ $(-a)$ عامل مشترك في الأس.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk^1\, e^{-\alpha k^{12} + ik^1 v} = \int_{-\infty}^{\infty} dk^1\, e^{-\alpha(k^{12} - \frac{i}{\alpha}k^1 v)}$$

لكي نتحصل على مربع كامل للأس $(k^{12} - \frac{i}{\alpha}u^1 v)$ نطرح ونـضيف الحـد $\frac{v^2}{4\alpha^2}$

$$u^{12} - \frac{i}{\alpha}k^1 v = k^{12} - \frac{v^2}{4\alpha^2} - \frac{i}{\alpha}k^1 v + \frac{v^2}{4\alpha^2}$$

$$= (k^{12} - \frac{v^2}{4\alpha^2} - - \frac{i}{\alpha}k^1 v) + \frac{v^2}{4\alpha^2}$$

$$= \left[k^1 - (\frac{iv}{2\alpha})\right]^2 + \frac{v^2}{4\alpha^2}$$

فيصبح التكامل على الصورة

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk^1\, e^{-\alpha\left\{\left[\underbrace{k^1 - (\frac{iv}{2\alpha})}_{q}\right]^2 + \frac{v^2}{4\alpha^2}\right\}}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk^1\, e^{-\alpha q^2} . e^{-\alpha\frac{v^2}{4\alpha^2}} = e^{-\frac{v^2}{4\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} dk^1 e^{-\alpha q^2}$$

الدالة زوجية وعليه يمكن كتابة التكامل $2\int_{0}^{\infty} du^1\, e^{-\alpha q^2}$

وقيمة التكامل يساوي $\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\int}{\alpha}}$

$$\therefore f(x) = \underbrace{e^{ikov}}_{\text{phase factor}} . \sqrt{\frac{D}{\alpha}}\ . e^{-\frac{v^2}{4\alpha}} \qquad ....(2-4)$$

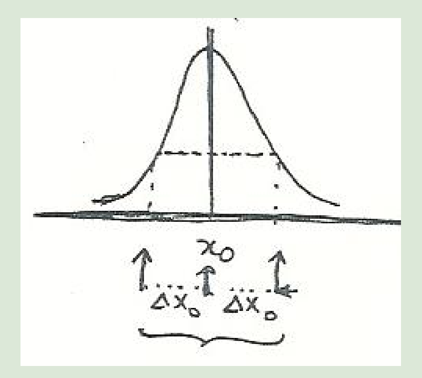
لاحظ أن الدالة (x) f في (2-4) دالة تخيلية. ولكي تبعد هذه الدالة علـى جسم يلزم أن تكون حقيقية. ولهذا السبب فالذي يهمنا ليس (x) f بل مربع القيمة المطلقة لأنها حقيقية.

$$|f(x)|^2 = f^*(x) f(x)$$
$$= (e^{-ikox} \sqrt{\frac{D}{\alpha}} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}})(e^{+ikox} \sqrt{\frac{D}{\alpha}} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}})$$
$$|f(x)|^2 = \frac{D}{\alpha} e^{-\frac{v^2}{2\alpha}} \qquad ....(2-5)$$

هذه الدالة تمثل جسيم.

الدالة (2-5) لها قيمة قصوى (أو قيمة) عند v = 0 وتعتمد على قيمة الثابت a، إذا كانت a كبيرة تكون الدالة عريضة والعكس صحيح إذا كانت a صغيرة فإن الدالة تعبر عن حزمة موجية ضيقة harrow وكما قلنا فإن $|f(x)|^2$ تعبر عن جسيم.

بإمكاننا أن نوجد عرض الدالة $|f(x)|^2$، كما شرحنا في الجزء السابق (ملحق A) نأخذ عرض الدالة Δv عندما تقل قيمتها إلى $1/e$ عن أقصى قيمة لها لكي تنزل الدالة من القيمة إلى $1/e$ هذا يحدث عندما يساوي الأس واحد أي عندما $\frac{v^2}{2a}=1$.

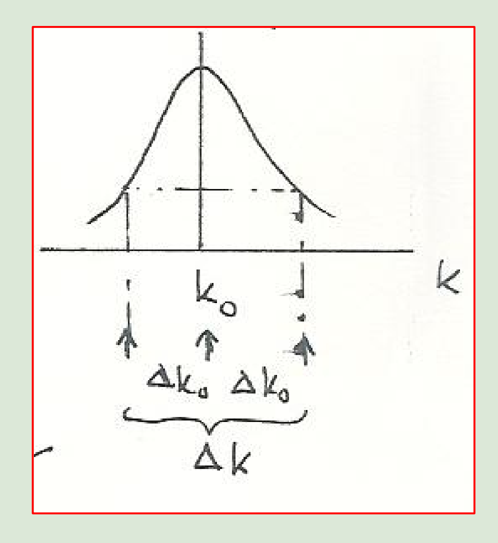


$$\Rightarrow v^2 = 2\alpha \Rightarrow \Delta v_{\circ} = \pm\sqrt{2\alpha}$$
$$\Rightarrow \Delta v = 2\sqrt{2\alpha} \qquad ....(2-6)$$

نوجد الآن عرض الدالة g (k) والتي تعطى بـــــ $g(k)=e^{-\alpha(k-k_{\circ})^2}$ والذي يهمنا هو عرض الدالة g^2 (k) وليس الدالة $g^2(k)=e^{-2\alpha(k-k_{\circ})^2 g(k)}$ هذه الدالة

متمركزة حول $k_\circ$ وليس حول $k = 0$ بل حول $k = k_\circ$ عرضها يوجد بنفس الطريقة، نوجد العرض عندما تقل الدالة إلى $1/e$ من قسمتها القصوى.

$$\Delta k = 2\Delta\Delta_\circ = (2)(\frac{1}{\sqrt{2\alpha}}) \quad ....(2-7)$$



لاحظ التناسب العكسي في عرض الدالة Δv في (2-6) والعرض في Δk في العلاقة (2-7) هذا يعني أنه كلما تميزت الدالة $f(x)$ في فضاء x كلما انبسطت واستعرضت في فضاء k والعكس صحيح.

ومن المهم أن ننظر إلى حاصل ضرب العرضين $\Delta u, \Delta v$

$$\Delta u.\Delta v = 2\frac{1}{\sqrt{2\alpha}}. \quad 2\sqrt{2\alpha} = 4 \quad ....(2-8)$$

الذي يهمنا في العلاقة (2-8) ليس القيمة العددية، الذي يهم هو أن حاصل الضرب $\Delta u, \Delta v$ لا يعتمد على قيمة الثابت α. هذه خاصية عامة لكل الدوال ترتبط ببعضها بتحويلات فورير كما هو موضح في شكل 1-2.

This is a general property of functions that are Fourier trans forms of each other.

ونخلص من هذا الجزء بالاستنتاج أنه من المستحيل أن نجعل كــلاً مــن Δv و Δk ذات قيم صغيرة. وهذه خاصية عامة للحزم الموجية، الأمر الــذي يترتب عليه نتائج هامة جداً في ميكانيكا الكم.

It is impossible to make both Δ v and Δk small.

This is a general feature of wouae packets, but we shall soon see rat it has some very deep implications for quantum mechanics.

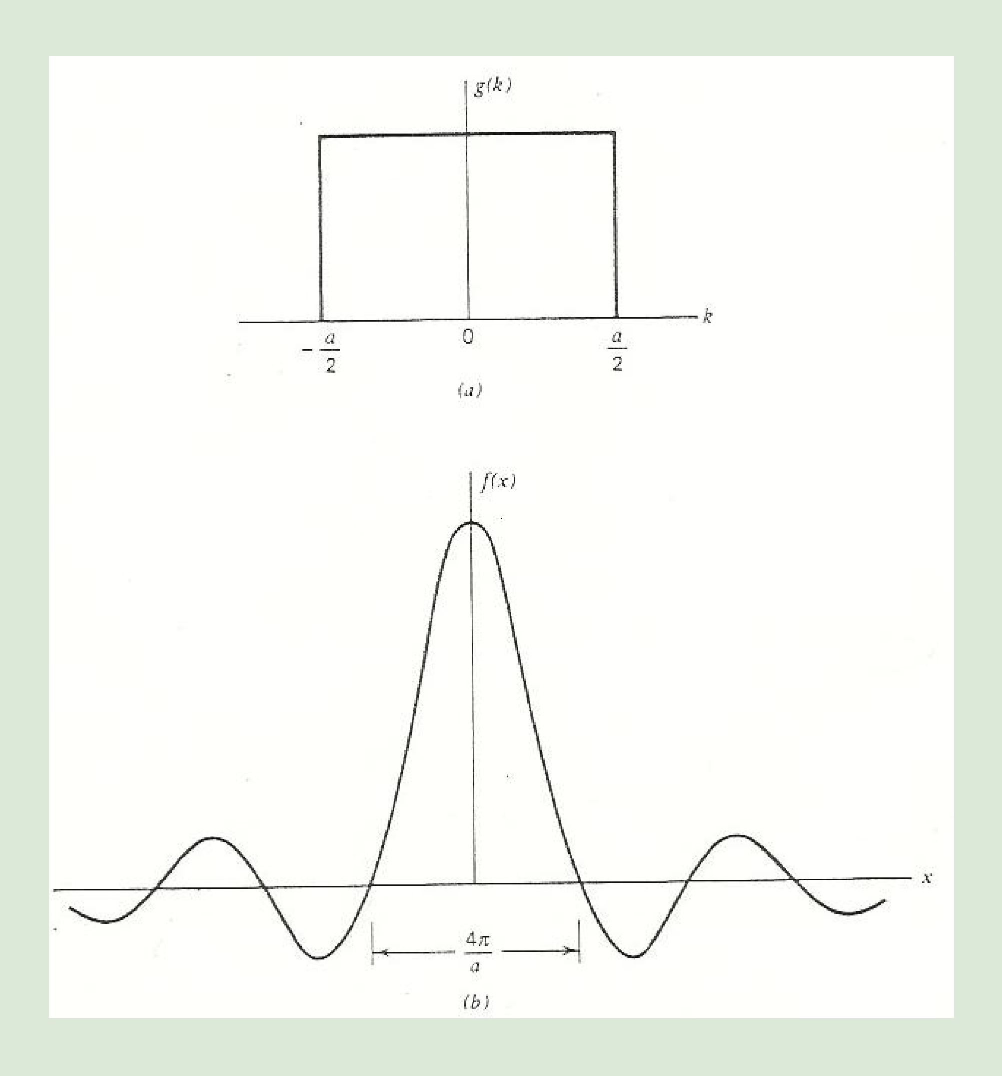


Figure 2-4 Relation between wave packet and its Fourier transform for a square-shaped wave packet.

انتشار الحزم الموجية

THE PROPAGATION OF WAVE PACKETS

بعدما درسنا تراكب موجات من نوع e^{ikx} لنتحصل على دالة $f(x)$، نـــود الآن مناقشة كيفية إنتشار هذه الموجات؟ بلا شك إن انتشار حزمة موجية يعتمد على إنتشار كل من الموجات المكونة لها. فلو أخذنا موجة تتغير مكانياً علـــى محور X (بينما لا تعتمد الموجة من حيث الإحداثيات t , y على الزمن). هـــذه الموجات تسمى موجات مستوية plane wanes، يمكن كتابة هذه الموجات كدالة في الزمن t والموجة X بالصيغة.

$$e^{iuv - iwt} \quad \ldots\ldots \; (2\text{-}9)$$

حيث

$$w = 2Dv$$

$$k = \frac{2D}{l}$$

بالتعويض في (2-9)

$$e^{i \frac{2D}{l}v - i2Dvt} = e^{2Di(\frac{v}{D} - vt)} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2-10)$$

لو أخذنا كحالة خاصة؛ إنتشار موجات الضوء في الفــضاء حيـــث $v = \frac{c}{l}$ للضوء، بالتعويض في (2-10).

$$e^{2Di(\frac{v}{l} - \frac{c}{l}t)} = e^{\frac{2D}{l}i(v-ct)} = e^{ik(v-ct)} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2-12)$$

خذ الآن تراكب الموجات سعتها $g(k)$ من هذا النوع من الموجات، فبعد مرور زمن قدره t

$$f(x_1 t) = \int_{-\infty}^{\infty} du\, g(u)\, e^{iu(v-ct)} = eik(v-ct)$$

إن هذه الدالة $f\ (x - ct)$ لها نفس الشكل الذي بدأت به قبل الانتشار مـــا عدا أن موقعها بدلاً من أن يكون X أصـــبح الآن متركـــز (أو متحيـــز) عنـــد

$v = ct \Leftarrow v - ct = o$

هذا يعني أن حزم الضوء الموجية تنتشر في الفضاء بلا تشويه.

Thus the wave packet go light waves propagates, without any distortion, with velocity, the velsal'y of light.

ولكن الذي يعنينا هنا انتشار موجات، يفترض أنها تُعبر عن جسيمات، في هذه الحالة لن نستطيع استخدام العلاقة.

$$w = kc \qquad \dots (2\text{-}13)$$

$$W\ (k) = kc$$

لاحظ هذه العلاقة صحيحة فقط في حالة انتشار حزمة ضوء موجية فـــي الفضاء. ولكي تنطبق دراستنا على انتشار حزمة موجية (جسيم) يلزم اســـتخدام العلاقة العلامة لــــ $w\ (k)$ حيث $w = (k) \neq kc \text{ or } kv$

في هذه الحالة نعيد كتابة معادلة (2-11) بالصيغة.

$$ik\,(v - ct)$$

$$f\,(x_1 t) = \int dk\, g\,(k)\, e^{ik\,(v - ct)}$$

لتصبح في حالة جسم حر الحركة

$$= dk\, g(k)\, e^{ikv - iw\,(k)t} \qquad \dots\dots\dots (2-14)$$

لاحظ أننا لم نعرف بعد الصيغة الحقيقية لطبيعة الدالة $w\ (k)$، ولكن خـــذ الآن حزمة موجية متمركزة ومتحيزة جداً حول $k_\circ$ في فضاء u.

هذا يعني أن α في العلاقة $g\,(k) = e^{-\alpha(k - k_\circ)^2}$ ستكون كبيرة. هذا قد لا يعني أن $f\ (x)$ ستكون متحيزة في فضاء v ولكن هذا التقريب سيسهل حساباتنا.

بما أن التكامل في (2- 14) متمركز حول $k_\circ$ مع افتـــراض أن $w(k)$ لا تتغيره بشدة مع تغير k.

$$w(k) \cong w(k_\circ) + (k-k_\circ)\left(\frac{dw(k)}{dk}\right)_{k_\circ} + \frac{1}{2}(k-k_\circ)^2\left(\frac{d^2w(k)}{dk^2}\right)_{k_\circ} \quad ....(2-15)$$

الحد الأول $w(k_\circ)$ ثابت لأنه لا يعتمد على k. الحد الثاني $\left(\frac{dw}{dk}\right)_{k=k_\circ}$ يمثل سرعة المجموعة group velocity - كما شرحنا في التمهيد - هي السرعة التي تـــسير بها الحزمة الموجية.

$$\Rightarrow \quad \left(\frac{dw}{dk}\right)_{k=k_\circ} = vg$$

and

$$\frac{1}{2}\left(\frac{d^2w}{dk^2}\right)_{k=k_\circ} = \beta \qquad (2\text{-}16)$$

بافتراض أن:

$$k^1 = k - k_\circ$$
$$\Rightarrow dk^1 = dk$$

فإن الحزمة الموجية تعتمد على الزمن بالصيغة.

$$f(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk^1\, e^{-\alpha k^{12}}\, e^{i(k^1+k_\circ)v - i\left[w(k_\circ)+k^1vg+k^{12}\beta\right]t}$$

خذ الحدود الثابتة خارج التكامل.

$$= e^{ik_\circ v - i\,w(k_\circ)t} \int_{-\infty}^{\infty} dk^1\; e^{-\alpha k^{12}} .\; e^{ik^1 v.}\; e^{-ik^1 vgt.}\; e^{-ik^{12}\beta t}$$

$$= e^{ik_\circ v - iw(k_\circ)t} \int_{-\infty}^{\infty} dk^1 e^{-\alpha k^{12}}\; e^{ik^1(v-vgt)}\; e^{-ik^{12}\beta t}$$

........(2-17)

وبنفس الطريقة التي أجريناها في الحالة الأولى، يمكن عمل التكامل عن طريق إكمال المربع في الأس، خذ الأس فقط.

$$e^{-\alpha k^{12} + ik^1(v-\mu gt) - ik^{12}\beta t} = e^{-(\alpha+i\beta t)k^{12} + ik^1(v-\mu_g t)}$$

خذ $-(\alpha+i\beta t)$ عامل مشترك.

$$=e^{-(\alpha+i\beta t)\left[k^{12}-ik^{1}\frac{(v-v_g t)}{(\alpha=i\beta t)}\right]}$$

للحصول على مربع كامل نطرح ونضيف الحد.

$$\frac{(v-v_g t)^2}{4(\alpha+i\beta t)}$$

$$e^{-(\alpha+i\beta t)\left[u^{12}-\frac{iu^{1}(u-v_g t)}{\alpha+i\beta\beta}\right]+\frac{(x-v_g t)^2}{4(\alpha+i\beta\beta)}-\frac{(x-v_g t)^2}{4(\alpha+i\beta t)}}$$

خذ هذه الإشارة مشترك مع الحد الأول

$$e^{-(\alpha+i\beta t)\left[k^{12}-\frac{ik^{1}(u-v_g t)}{\alpha+i\beta t}-\frac{(u-v_g t)^2}{4(\alpha+i\beta\beta)}\right]-\frac{(x-v_g t)^2}{4(\alpha+i\beta t)}}$$

$$\Rightarrow$$

$$e^{-(\alpha+i\beta t)\left[k^{1}-\frac{i(u-v_g t)}{2(\alpha+i\beta t}\right]^2+\frac{1}{4}\frac{(x-v_g t)^2}{(\alpha+i\beta t)}} \qquad \text{..........}(2-18)$$

بتعويض (2-18) في (2-17) نتحصل على:

$$f(x_1 t)=e^{i(k_\circ x-w(k_\circ)t)}\int_{-\infty}^{\infty}dk^{1}\,e^{-(a+ibt)\left[k^{1}-\frac{(v-m_g t)}{2(a=ibt)}\right]^2}\underbrace{e^{-\frac{(x-v_g t)^2}{4(a+ibt)}}}_{\text{ابت هذا الحد ثابت}}$$

$$=e^{i(k_\circ x-w(k_\circ)t}\,e^{-\frac{(x-y_g t)^2}{4(a+ib\,t)}}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}dk^{1}e^{-(a+ibt)\left[k^{1}-\frac{i(x-u_g t)}{2(a+ibt)}\right]^2}}$$

$$f(x_1 t)=e^{i(u_\circ x-w(k_\circ)t}\,e^{\frac{-(x-u_g t)^2}{4(\alpha+i\beta t)}}\sqrt{\frac{\mathbf{D}}{(\alpha+i\beta t)}}$$

$$|f(x_1 t)|^2=f(n_1 t)f^{*}(x_1 t)=e^{\circ}.e^{-\frac{(v-u_g t)^2}{4(\alpha+i\beta t)}-\frac{(v-u_g t)^2}{4(\alpha-i\beta t)}}\sqrt{\frac{\mathbf{D}}{(\alpha+i\beta t)}\frac{\mathbf{D}}{(\alpha-i\beta t)}}$$

$$=1.\left[e^{-\frac{(v-u_g t)^2}{2}\left(\frac{2\alpha}{\alpha^2+\beta^2 t^2}\right)}\right]\left[\frac{\mathbf{D}}{(\alpha^2+\beta^2 t^2)}\right]$$

$$=e^{-\frac{(v-u_g t)^2}{2(\alpha+\beta^2 t^2/\alpha\alpha}\frac{\mathbf{D}}{(\alpha^2+\beta^2 t^2)}}$$

بقسمة الأس في البسط والمقام على α .

بمقارنة الصيغة في (2-19) بـــ (2-5) $\left\{ |f(x)|^2 = \frac{D}{\alpha} e^{-\frac{v^2}{2\alpha}} \right\}$

نجد أن هناك تماثل مع ملاحظة أن v في (2-5) تغيرت لـــ $(v - u_g t)$ و α تحولت لـــ $\alpha + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha}$

ولهذا فإن $|f(x_1 t)|^2$ تمثل حزمة موجية تسير بسرعة u_g ولكـــن عـــرض هذه الحزمة غير محدد ولكن يتغير مع الزمن، لاحظ أن عرض الدالة (2-19).

$$\Delta v = 2.\Delta v_\circ = 2.\sqrt{2(\alpha + \beta^2 t^2/\alpha\alpha}$$

or

$$\Delta v = \sqrt{8\alpha}\,(1 + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha^2})^{1/2} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots(2-20)$$

من المعادلة (2-20) يتضح أن عرض الدالة يزداد مع الزمن أي أن الدالة تنبسط مع مرور الزمن وذلك مقارنة بعرضها عند t = 0

$$\Delta v = (t = 0) = \sqrt{8\alpha}$$

أما عند أي زمن آخر فإن عرض الدالة يعطي بالصيغة (2- 20) إن معدل الانبساط في الدالة سيكون صغيراً إذا كانت α كبيرة أي إذا كانت الدالة منبسطة كثيراً عند البداية.

من الحزم الموجية إلى معادلة شرودنجر:

FROM WAVE PACKETS TO THE SCHRöDINGER EQUATION

إذا كانت الدالة $\{f(x,t)=\int dk\, g(u)\, e^{iku-iw(k)t}\,.........\}$ تمثل جسيم كمية الحركة له تساوي p وطاقته الحركية $(p^2/2m)$، فإن هذا يستلزم أن سرعة المجموعـــة u_g تعطى بالمعادلة.

$$u_g=\frac{dw}{dk}=particle\ velocity\Rightarrow=\frac{p}{m}\ ....(2-21)$$

ومن افتراضات ميكانيكا الكم، فإن أي إشعاع له تردد w فإنه يقابله طاقة E تعطى بالعلاقة.

$$E=\mathbf{h}w$$

or

$$w=\frac{E}{\mathbf{h}}$$

إذا كانت E هي طاقة جسيم حر،فإنها تمثل طاقته الحركية $p^2/2m$ أي أن.

$$w=\frac{(p^2/2m)}{\mathbf{h}}=\frac{p^2}{2m\mathbf{h}}\qquad(2-23)$$

وعليه فمن الممكن أن نكتب متجه الموجة k (بنفس الطريقة) ومن معادلة ديبرولي $l=\frac{n}{p}$.

$$k=\frac{2D}{\lambda}=\frac{2D}{(\frac{\mathbf{h}}{p})}=\frac{p}{(\frac{\mathbf{h}}{2D})}=\frac{p}{\mathbf{h}}\qquad................(2-24)$$

ولهذا السبب يمكننا إعادة كتابة الصيغة (2-14) بدلالة p (بدلاً من k)

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2D\mathbf{h}}}\int dp\ \ \psi(p)\,e^{i(px-Et)/\mathbf{h}}\qquad...........(2-25)$$

حيث أن الحزمة الموجية $\psi(x,t)$ تمثل الحل العـــام للمعادلـــة التفاضـــلية الجزئية .partial differentiable.

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x_1,t)}{\partial t}=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int dp\,\varphi(p)\,E\,e^{i(px-Et)/\hbar}$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int dp\,\varphi(p)\frac{p^2}{2m}e^{i(px-Et)/\hbar}\qquad\text{..........}(2-26)$$

حيث أن (2-26) يمكن الحصول عليها بتفاضل $\psi(x_1t)$ مرتين بالنسبة لـ x.

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int dp\,\varphi(p)\frac{\partial}{\partial x}e^{i(px-Et)/\hbar}\right]$$
$$=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{2\pi h}\int dp\,\varphi(p).\frac{ip}{h}e^{i(px-Et)/h}\right]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int dp\,\varphi(p)\frac{ip}{h}.\frac{ip}{h}e^{i(px-Et)/\hbar}\Big]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int dp\,\varphi(p)\left(-\frac{p^2}{\hbar^2}\right)e^{i(px-Et)/\hbar}\Big]\text{..............}(2-27)$$

ولكي تتساوى معادلة (2-27) بـ (2-26) من الطرف الأيمن، يلزم ضرب طرفي (2-27) في $\frac{-\hbar^2}{2m}$، أي

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int dp\,\varphi(p)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(-\frac{p^2}{\hbar^2}\right)e^{i(px-Et)/\hbar}\Big]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int dp\,\varphi(p)\left(\frac{p^2}{2m}\right)e^{i(px-Et)/\hbar}\Big]$$

وعليه فإن:

$$ih\frac{\partial\psi(x_1t)}{\partial t}=-\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(v_1t)}{\partial v^2}\qquad\text{..............}(2-28)$$

وهذه صحيحة لجسم حر.

علاقات اللاتحديد (اللاتعيين) The uncertainty Relations

أحد النتائج المهمة التي توصلنا لها من مناقشتنا للحزم (الرزم) الموجية هي المعكوسة للعلاقة بين الأعراض في فراغ v و فراغ k .

$$\Delta k\,\Delta v\geq 1$$

بضرب الطرفين بـ h وباستعمال العلاقة $p=\mathbf{h}k$

سنتحصل على علاقة هايزنبرج Heisenberg ancernrainrg clarion

$$\Delta p \Delta v \geq \mathbf{h} \qquad \text{........(1)}$$

وبما أن العرض يمثل المنطقة التي من المحتمل أن يكون في الجسم فضاء(p- , v - I) فإن المعادلة (1) تبين:

لو أردنا أن نعمل حزمة (رزمة) متمركزة (متميزة جداً) وموجية في x فضاء، فإنه من المستحيل علينا أن نشارك بها كمية حركة معرفة جيداً. (الأمر الذي يعتبر بديهي وعليه فإن رزمة موجية ذات كمية محددة من كمية الحركة يجب أن تكون غير متميزة في فضاء -v أي أن تكون عريضة جداً.

وهذا الحد (الحصر) واحد من إلزامات ميكانيكا الكم على وصفنا للأنظمة الفيزيائية بالمفاهيم التقليدية. في الفيزياء التقليدية كالأمر p, x (الموقع، كمية الحركة) مستقلات عن بعضهما.

بينما في ميكانيكا الكم p, x مكملين لبعضهما.

لاحظ أنه من قيمة **h** الصغيرة يتضح لنا أن ميكانيكا التقليدية تفشل في حالة الأنظمة المجهرية فلو اعتبرنا أن حبة غبار $m = 10^{-4} g$ ، $u = 10^{4} cn/s$

مثال: خذ جسماً كتلته $m1\mu g$ وموقعه معروف لدقة $1\mu m$، احسب اللاتعيين في كمية حركته Δp من المعادلة السابقة.

$$\Delta p \Delta v \geq \frac{\mathbf{D}}{2} \Rightarrow \Delta p \geq \frac{\mathbf{h}}{2\Delta v} \qquad \Bigg\| \; J = kg.\frac{m^2}{s^2}$$

$$\Delta p \geq \frac{6.63\times10^{-34}\,J.S}{4\mathbf{D}\times1\times10^{-6}\,m} = 0.5\times10^{-28}\,\frac{J.S}{m} = 5\times10^{-29}\,k_g\,\frac{m}{s}$$

وهذا يطابق سرعة مقدارها $\Delta v = 5\times10^{-20}\,\frac{m}{s} = \frac{5\times10^{-29}\,u_g\,m/s}{1\times10^{-9}\,u_g}$

وهذه القيمة مهملة. وعليه فإن للأجسام الكبيرة علاقة اللاتعيين ليست ذات أهمية وعليه فإن (في هذه الحالة) الميكانيكا التقليدية تعطي نفس القيمة.

قياس مكان إلكترون (ميكروسكوب هيزبنرج)

Measwrcmerg position of aneleiton (Hesibdoceg Microswgee)

شعاع من الإلكترونات لها كمية حركة محددة جيداً p_x تتحرك في اتجاه t_x والغرض من الميكروسكوب الشاشة هي رؤية موقع الإلكترون وذلك بمـــشاهدة الضوء المتشتت من الإلكترون.

إن استطام الفوتونات بالإلكترون يرتد خلال الميكروسكوب. وإن قـــدرة تحليل الميكروسكوب bastion (أي الدقة التي بها يمكننا تحديد موقع الإلكترون من معلومات من الضوء).

حيث λ طول موجة الضوء $\Delta v \sim \frac{\lambda}{\sin j}$

يجعلλ أقل ما يمكن و j أكبر ما يمكن بإمكاننا تصغير Δv للحد المرغوب هذا يمكننا فعله على حساب معلوماتنا من دقة كمية الحركة في اتجاه nx.

ميكانيكا الكم تخبرنا بأن الإشارات المسجلة على الشاشة هي عبارة عـــن فوتونات تشتت من الإلكترونات اتجاه الفوتونات بعد التشتت غير محدد خـــلال الزاوية المقابلة للفتحة وعليه كمية الحركة المرتدة للإلكترون غير محددة بـــ

$$\Delta p(\sin j + \sin j).\frac{\mathbf{h}}{\lambda}$$

$$\lambda\frac{c}{v} \Rightarrow j = 2\sin j.\frac{h}{\frac{c}{v}} \Rightarrow \Delta p_x \sim 2\frac{hv}{c}\sin\varphi$$

وعليه

$$\Delta p_v\, \Delta v \sim 2\frac{\mathbf{Dv}}{c}\sin j.\frac{\lambda}{\sin j} \sim 4\mathbf{Dh}$$

لتحسين دقة الموقع للإلكترون يجب أن نستخدم ضوء ذو λ صغيرة لكن هذا ينتج خطأ كبير أو تشويش كبير في كمية الحركة والعكس: لو أردنا أن نقلل الخطأ بقياسنا بكمية الحركة يجب أن نستخدم إشعاع ذو طول موجي كبير وهذا بدوره يؤدي إلى خطأ كبير في الموقع.

وعليه فإن مبدأ اللاتعيين هو ناشئ من طريقة القياس نفسها. وعلى المستوى الذري فإن القياس نفسه ينشأ عنه خطأ وتشويش ملحوظ للنظام وذلك للتفاعل بين جهاز القياس الكمية المقاسة.

ومبدأ اللاتعيين يقرر أننا لا نستطيع تحديد مسار جسم بدقة متناهية كما هو الحال في الميكانيكا التقليدية.

مثال: بافتراض أن اللاتعيين في موقع جزئ هيدروجين (الذي كتلته 2×10^{-27} kg) يقدر بحوالي 10^{-10} m احسب قيمة اللاتعيين في كمية الحركة؟ وكذلك النسبة $\frac{\Delta p_x}{p_x}$

$$\Delta p_x \geq \frac{\mathbf{h}}{\Delta x} = \frac{6.6\times10^{-34}}{(2\mathbf{D})10^{-10}} \geq 6.6\times10^{-24}\ \text{kg}-\text{m/s}$$

كمية حركة الجزئ الذي يتحرك بسرعة $2000\frac{m}{s}$ (السرعة الحرارية عند درجة حرارة الغرفة)

$$P_x = mc = 2\times10^{-27}\ \text{kg}\times2\times10^{3}\ \frac{m}{s} = 4\times10^{-24}\ \text{kg.m/s}$$

وعليه فإن نسبة اللاتعيين:

$$\frac{\Delta p_x}{p_x} = \frac{6.6\times10^{-24}}{4\times10^{-24}} = 1.7 \qquad 0.25$$

وعليه فإن كمية حركة هذا الجزئ لا يمكن تحديدها بدقة أكثر من القيمة الألأصلية.

لكن: لو أخذنا كتلة، لها سرعة $1000\frac{m}{s}$، موقعها محدد لدقة 1. mm هـذا الجسم مقدار اللاتعيين في كمية حركته.

$$\Delta p \geq \frac{6.63\times10^{-34}}{10^{-3}m} = \frac{6.6}{2\pi}\times10^{-31}\ kg-m/s$$
$$p = 0.005\times1000 = 50\ kg\text{-}m/s$$

نسبة اللاتعيين.

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{6.6\times10^{-31}\ kg-k/s}{} = 1.3\times10^{-32}$$

وهذا رقم صغير جداً ولا يمكن قياسه بأي جهاز.

مثال: زمن الحياة للحالة المثارة لذرة الهيدروجين $10^{-8}s$. فإن اقل قيمـة للاتحديد للطاقة هو؟

$$\Delta E.\Delta t \geq \hbar$$

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{\Delta t} = \frac{6.6\times10^{-34}}{2\pi\times10^{-8}} = 1.0\times^{-26}\ J = 6.5\times10^{-8}\ ev.$$

وهذا يسمى عرض الطاقة للحالة المثارة.

العلاقة بين طول الموجة والتردد فـي موجـة الموجـات wave Guide تعطي بالمعادلة:

$$l = \frac{c}{\sqrt{v^2 - v_\circ^2}}$$

أوجد سرعة المجموعة v_g لهذه الموجات.

$$l^2 = \frac{c^2}{v^2 - v_\circ^2}$$

$$\frac{4\pi^2}{\pi^2} = \frac{(v^2 - v_\circ^2)}{c^2} = \frac{w^2 - w_\circ^2}{c^2}$$

$$k=\frac{2\mathbf{D}}{l}\Rightarrow k^2=\frac{4\mathbf{D}^2}{l^2}$$

$$w=2\mathbf{D}v\Rightarrow v=\frac{w}{2\mathbf{D}}$$

$$v^2=\frac{w^2}{v\mathbf{D}^2}$$

$$k^2=\frac{w^2-w_\circ^2}{c^2}\Rightarrow c^2k^2=w^2-w_\circ^2\Rightarrow k=\sqrt{\frac{w^2-w_\circ^2}{c}}$$

بالتفاضل بالنسبة لــ w

$$c^2\,2kdk=2\,w\,dw\Rightarrow\frac{dw}{dk}=\frac{c^2k}{w}$$

$$v_g=\frac{dw}{dk}=\frac{c^2k}{w}=\frac{c}{w}\sqrt{w^1-w_\circ^2}=c\sqrt{1-\frac{w_\circ^2}{w^2}}$$

$$=c\sqrt{1-\frac{v_\circ^2}{v^2}}$$

مثال: حزمة من النيوترونات بطاقة متوسطة للنيترون الواحد = 1 mev.

بدأت الحزمة باتساع 1 cu، احسب اتساع الحزمة بعد قطع مسافة 10 km في الفراغات.

الاتساع $\mathbf{b}_\mathbf{b}\ \Delta y$

$$\Delta y=1com,\Rightarrow\Delta p_y?\quad,\quad\Delta p_y.\Delta y\geq\mathbf{h}$$

$$\therefore\Delta p_y=\frac{\mathbf{D}}{2\mathbf{D}\Delta y}=\frac{6.6\times10^{-34}}{4\mathbf{D}\times10^{-2}\,m}=5.3\times10^{-33}\ kgm/sec$$

$$p_x=\sqrt{2m_nE}=\sqrt{2(1.67\times10^{-27})(10^6\,en)(1.6\times10^{-19})}$$

$$=2.3\times10^{-20}\quad kg.m/\sec$$

$$\therefore tomq=\frac{5.3\times10^{-33}}{2.3\times10^{-20}}$$

$$\frac{R}{x}=$$

$$\frac{R}{x}=\tan\theta\Rightarrow R=v\tan\theta=10^9\,m\times\frac{5.3\times10^{-33}}{2.3\times10^{-20}}=2\times10^{-4}\,m$$

وعليه فإن الحزمة ستزداد من 1am بمقدار 2R.

$$2R=4\times10^{-4}\ m=4\times10^{-2}\ con=0.4$$

سيصبح 10.4 nm

س/ كم يبلغ عدم التحديد (اللاتحديد) في موضع فوتون طول موجته $3000\,\mathring{A}$ إذا كانت دقة تحديد طول الموجة يصل إلى جزء من المليون؟

$$\frac{\Delta l}{l}=10$$

س/ إذا كانت إلكترون في حالة مشتاقة أولي مدة 10^{-6} s احسب عدد اللفات التي سيلفها في هذا المدار.

$$T=\frac{2D}{w}=\frac{2Dh}{hw} \rightarrow hw=(E_2)=\frac{13.6}{4}=$$

$$T=\frac{2D(1.05\times10^{-34})}{(\frac{13.6}{4})(1.6\times10^{-19})}=1.2\times10^{-15}\ \sec$$

$$T=\frac{\tilde{C}}{T}=\frac{10^{-8}\sec}{1.2\times10^{-15}}=8\times10^{6}\ tw$$

اتساع الخط الطيفي الذي له طول موجة $4000\,\mathring{A}$ هــو $0.0001\mathring{A}$ احــسب متوسط زمن مكوث النظام الذري في حالة الطاقة المناظرة.

$$D=4000\,\mathring{A},\ \Delta\lambda=10^{-4}\,\mathring{A}=10^{-14}\,m.$$

$$|\Delta E|=h\Delta v=\frac{hc}{D}\frac{\Delta D}{D}=\frac{hc\Delta D}{D^2}$$

عدم التحديد في الزمن Δt ، زمن مكوث الذرة في الحالة المستثارة.

$$\grave{C}=\Delta t=\frac{4Dh}{|\Delta E|}=\frac{4hD^2}{c^D\Delta D}$$

$$=\frac{(4)(16)(10^{-14})}{(3\times10^{8})(10^{-14})}=2.1\times10^{-7}\ \sec.$$

$$=0.21\mu\,\sec.$$

س/ الطاقة المستثارة لها إشعاع يساوي 1.1ev، احسب متوسط عمر هذه الحالة؟

من علاقة اللاتحديد $\Delta t.\Delta E=\frac{h}{2D}$

$$\Delta E = \hbar \Delta v$$

$$\Delta t = \frac{h}{2\hbar \Delta E} = \frac{6.6\times 10^{-34}}{2\hbar \times 1.1 ev} = ...?$$

حزمة موجية معرفة بـــ $F(x) = \int_{-\infty}^{\alpha\infty} dk\, g(k) e^{ikx}$

حيث $g(k)$ تعطي بـــ

$$\begin{aligned} g(k) &= o & k \langle -k/2 \\ &= N & -k/2 \langle k \langle k/2 \\ &= o & \frac{4}{2} \langle k \end{aligned}$$

قيمة N التي لها

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |f(x)|^2 = 1$$

$$\therefore f(x) = \frac{2N}{x} \sin \frac{kx}{2}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{4N^2}{x^2} \sin^2 \frac{kx}{2} =$$

$$\int \frac{2}{k} du . \frac{4N^2}{\frac{2u^2}{k^2}} Sin^z u = 2kN^2 \int_{-\infty}^{+\infty} du \frac{\sin^2 n}{u^2} = 2\hbar N^z = 1$$

$$\Rightarrow N = \sqrt{\frac{1}{2\hbar k}}$$

كيف هذه مرتبطة باختيار N التي لها

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk |g(u)|^2 = \frac{1}{2\hbar}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk |g(u)|^2 = N^2 \int_{-k/z}^{u/z} dk = N^2 k = \frac{1}{2\hbar}$$

$$\Rightarrow N \sqrt{\frac{1}{2\hbar k}}$$

من المناسب اختيار عرض v بين نقطتين التي عندها الدالة $\sin \frac{kv}{2}$ تتلاشى. وهذا يحدث عند $\Delta u = \frac{u\hbar}{u} \Leftarrow x = \pm \frac{2\hbar}{k}$

$$\therefore \Delta x \Delta k = (\frac{u\mathbf{D}}{u})u = u\mathbf{D}$$

لا تعتمد على u.

$$v_g = \frac{dv}{dk} = \frac{2\mathbf{D}\,dv}{2\mathbf{D}\,d(1/\mathbf{D})} = \frac{dv}{d(1/\mathbf{D})} = -\mathbf{D}^2\frac{dv}{d\mathbf{D}} \qquad (1)$$

$$Q\mathbf{D} = \frac{2}{\sqrt{v^2 - v_\circ^2}} \qquad , \qquad \mathbf{D}^2 = \frac{C^2}{v^2 - v_\circ^2}$$

$$\therefore \frac{v^2}{C^2} = \frac{v_\circ^2}{c^2} + \frac{1}{\mathbf{D}^2} \Rightarrow \frac{2v\,dv}{c^2} = -2\frac{dv}{\mathbf{D}^2} \Rightarrow \frac{dv}{d\mathbf{D}} = \frac{c^2}{\mathbf{D}^3}$$

$$(1) \qquad -\mathbf{D}^2\frac{dv}{d\mathbf{D}} = (-\mathbf{D}^2).(\frac{c^2}{\mathbf{D}^3 v}) = \frac{c^2}{\mathbf{D}v} = c\sqrt{1 - v_\circ^2/v^2}$$

$$= \frac{c}{v_\circ \frac{c}{\sqrt{v^2 - v_\circ^2/v^2}}} = \frac{c}{v(\frac{1}{\sqrt{v^2 - v_\circ^2}})} = \frac{c}{v}\sqrt{v^2 - v_\circ^2}$$

$$u_g = c\sqrt{1 - v_\circ^2/v^2}$$

المعادلة الموجية لشرودنجر وتفسير الاحتمال

The Schrödinger wave Eqn. nd the Probability Interpretation

في هذا الفصل سنناقش بعض خواص معادلة شرودنجر للجسم الحر، هذه المعادلة التي استنتجناها في الفصل الثاني. وكذلك سنستنتج تفسير الاحتمال للدالة الموجية Ψ وهذا بدوره يؤدي إلى تعريف كمية الحركة montentum في ميكانيكا الكم، وكذلك لمعادلة شرودنجر التي تصف جسم في جهد V (x).

ونقطة البداية هي المعادلة التفاضلية.

$$i\mathbf{h}\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\mathbf{h}^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots(1)$$

وهذه معادلة صحيحة لوصف حركة جسم حر. وحل هذه المعادلة يمكن الحصول عليه (بعكس الخطوط التي أدت إليها).. ونتحصل على الحل العام:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\mathbf{D}\mathbf{h}}}\int ap\, j\ (p)\, e^{i(px - Et)/\mathbf{h}}$$

وحيث أن E للجسم الحر هي $p^2/2m$

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2Dh}}\int ap\, j\ (p)\, e^{i(px-(p^2/2m)t)lh} \qquad ....(2)$$

ومن الجدير بالملاحظة: أن المعادلة (١) هي معادلة تفاضلية من الدرجة الأولى وهذا يعني أننا بمجرد أن نعرف القيمة الأولية لـ $(y\ (x,o))$ فإن قيمة $(y\ )$ عند كل الأزمنة الأخرى يمكن معرفتها.

$$\psi(x,t+\Delta t)=\psi(x,t)+\frac{\partial\psi^{(x,t)}}{\partial t}\Delta t$$

$$\frac{\partial\psi^{(x,t)}}{\partial t}=\frac{i^2h^2}{i2mh}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial xH2}=\frac{ih}{2m}\frac{\partial\psi}{xt^2}$$

$$\psi(x,t+\Delta t)=\psi(x,t)+\frac{ih}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\Delta t$$

$$\psi(x,t+\Delta t)=\psi(x,t)+\frac{ih}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\Delta t ....(3)$$

وبإعطاء قيمة $y\ (x,o)$ الدالة $j\ (p)$ يمكن إيجادها من (2) ضع $t = o$ في المعادلة (2) تكامل فورير.

$$\psi(x,o)=\frac{1}{\sqrt{2xh}}\int dp\,\varphi(p)\,e^{ipx/h} \qquad ....(4)$$

يمكن عكسه للحصول على $j\ (p)$

شروط المعايرة:

$$j\ (P)=\sqrt{2Dh}\int\psi(x,o)dx\, e^{ipx/h}$$

وبالتعويض في المعادلة (2) يمكننا حساب $\psi(x,t)$ عند كل قيم t..

لاحظ أنه لا يوجد "لا تعيين" في المعادلة التفاضلية:

طالما once نعرف القيم الأولى للحالة (للحزمة الموجبة) لا توجد قيود على قيم $\psi(x,o)$ عندئذ الحزمة الموجية كلها معرفة عند كل الأزمنة التالية..

تفسير الاحتمال للدالة الموجية $y\ (x,t)$

ونحن بصدد البحث عن تأويل (تفسير) للدالة $y\ (x,t)$ يجب أن يكون في تفكيرنا.

(1) أن $y\ (x,t)$ هي بشكل هام دالة معقدة conglex fetom.

(2) الدالة $\underbrace{|\psi(x,t)|}_{\text{كمية حقيقية}}$ تكون كبيرة حيث يفترض أن يكون الجسم موجود وتكون صغيرة في أماكن غير هذا المكان.

(3) وكذلك مصاحب للدالة ظاهرة الانبساط (Spreading) (اللاتحيز).

ومباشرة بعد اكتشاف معادلة شرودنجر (التي تبعث اكتشاف ميكانيكا الكم بواسطة هيزبنرج سنة ١٩٢٥) قام MaxBorn بدراسة تبعثر (تطاير) شعاع من الإلكترونات بهدف أو التي أرشدته إلى التأويل الصحيح للدالة الموجية. وعليه فقد اقترح أن.

تكون كبيرة حينما يفترض أن يكون الجسم $\Leftarrow p(x,t) \Rightarrow$ دالة حقيقية وتفلطحها لا يعني أن الجسم متفلطح.

وكل ما تعنيه هو أنه عندما يتغير الزمن يكون من الأقل احتمالاً أن نجد الجسم حينما كان عند $t = 0$.

ولكي يكون التأويل صحيحاً يلزمنا:

$$\int_{\infty}^{x\infty} p(x,t)dx = 1 \qquad (6)$$

شرط المعايرة vormalization

وذلك لأن الجسم يجب أن يكون في مكان ما وسيتضح لنا لاحقاً أن يكفي أن يلزم أن:

$$\int_{\infty}^{x\infty} dx\,|\psi(x,o)|^2 \langle \infty \qquad (7)$$

وهـــذا يعنـــي أن الدالـــة $y(x,o)$ يجـــب أن تكـــون مربعـــة متكاملـــة squaredintegrabli وبنطاق تكامل $-\infty \leftarrow +\infty$ يعني أن $y(x,o)$.

يجب أن تؤول إلى صفر أسرع من $x^{-1/2}$ وهذا يلـــزم أن تكـــون الدالـــة $\psi(x,t)$ متصلة في x .contineon sin x.

أهمية الأطوار: Import on ce of the ases

يبدو للوهلة الأولى كون الدالة $|\psi(x,t)|^2$ ذات معنى فيزيـــائي، يبـــدو أن الطول ليس له أهمية. وهذا خطأ.

وبما أن المعادلة (1) هي معادلة خطية، (وباقتران أن $\psi_2(x,t), \psi_1(x,t)$ هي حل.

هذا كذلك حل. $\leftarrow \quad \psi(x,t) = \psi_1(x,t) + \psi_2(x,t) \qquad (8)$

لو أن $\psi_2(x,t) = R_2 e^{i\theta\theta}, \psi_1(x,t) = R_1 e^{i\theta_1}$

حيث أن $R_1, R_2, \theta_1, \theta_2$ هي حقيقة، عندها

$$\begin{aligned} |\psi(x,t)|^2 &= \left| e^{i\theta_1} \left(R_1 + R_2 e^{i(\theta_2 - \theta_1)}\right) \right|^2 \\ &= R_1^2 + R_2^2 + 2R_1 \cos(\theta_1 - \theta_2) \qquad (9) \end{aligned}$$

وهذا يظهر أن الطور مهم، الطور الكلي في $\psi(x,t)$ يمكن إهمالـــه، أمـــا الطول النسبي $(\theta_1 - \theta_2)$ بين دالتين موجبتين ψ_1 و ψ_2 تظهر في $|\psi|^2$.

لاحظ أن الطرف الأيمن في المعادلة (9) هو الذي نـــراه عنـــد تراكـــب الموجات. وفي الحقيقة أنها الخطوة lineally للدوال الموجبة التي أدت لـــ لشكل التداخل الذي يظهر من خلال cosine في هذه المعادلة.

وعندما نتحدث عن السلوك الموجي للإلكترونات، الفوتونات، فتحدث من الخطية...

احتمال التيار Peobalrility current

لنأخذ complex conjugate المرافق المعقد للمعادلة (1).

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}\quad\Rightarrow\quad\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

$$\Rightarrow\quad -i\hbar\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*(x,t)}{\partial t^2}\quad\Rightarrow\quad\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t)=\frac{\partial}{\partial t}\overbrace{(\psi(x,t)\psi^x(x,t))}^{|\psi|^2}$$

$$=\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$=\left[-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial\psi^*}{\partial x^2}\psi^*\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right]$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi-\psi^*\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^t}\right]$$

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t)=-\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\Rightarrow\frac{\partial}{\partial t}t(x,t)=-\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,p(x,t)\quad=-\int_{-\infty}^{+\infty}dx\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)=o$$

$$=-[J(-\infty)-j(-\infty)]=0,\quad j\to 0$$

معادلة (12) ⇐ تبين: التغير في الكثافة في منطقة فـــي x يتعـــوض بـــالتغير الصافي في الفيض في تلك المنطقة.

Q الدوال متكاملة التربيع square integreble تتلاشى عند ∞

$$\frac{\partial}{\partial t}\int ax\,p(x,t)=-\int_{-\infty}^{\infty}dx\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)$$

$$=j(a,t)-j(b,t)\qquad(14)$$

وتعريف لـــ $j(x,t),p(x,t)$ وقانون البقاء تكون صحيحة لـــو المعادلـــة (1) تتغير لـــ

وهذه التعريفات لــ $d(x,t),p(x,t)$ وقانون الحفظ (البقاء) تبقــى صــحيحة حتى لو غيرنا معادلة الجسم الحر للمعادلة التالية معادلة شرودنجر.

$$it\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\mathbf{h}^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x}+\psi(x,t) \qquad (15)$$

وهذه مهمة لأنها تمثل معادلة شرودنجر لجسم في جهد V(x) في ثلاثــة أبعاد.

$$\begin{aligned}&\psi(x,y,z,t),\\&V(x,y,z)\\&\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Rightarrow\nabla^2\end{aligned}$$

كذلك تعميم (12)

$$\frac{\partial}{\partial t}p(r,t)+\nabla.J(r,t)=0$$

$$p(r,t)=|\psi(r,t)|^2$$

$$i\mathbf{h}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\mathbf{h}^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t)+v(r)\psi(r,t)$$

$$j(r,t)=\frac{\mathbf{h}}{2im}\left[\psi^*(r,t)\nabla\psi(x,t)-\nabla\psi^*(r,t)\psi(r,t)\right]$$

القيم المتوقعة وكمية حركة الجسم

Expectation Values of Canticle nonctn

بإعطاء كثافة الاحتمال. P (x,t).

فإن القيمة المتوقعة لــ f (x) يمكن حسابها بشكل عام.

$$\begin{aligned}\langle f(x)\rangle&=\int ax\, f(x)p(x,t) \qquad (20)\\&=\int ax\,\psi^*(x,t)f(x)\psi(x,t)\end{aligned}$$

لاستنتاج مؤثر كمية الحركة من الميكانيكا

$$p = mv = m\frac{dx}{dt} \qquad (21)$$

$$\langle p\rangle = m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = m\frac{d}{dt}\int dx\,\psi^{*}\,9x,t)\,v\,\psi(x,t) \qquad (22)$$

$$\langle p(x)\rangle = m\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,(\frac{\partial\psi^{*}}{\partial z}x\psi + \psi^{*}x\frac{\partial\psi}{\partial z})$$

$$\langle\, p(x)\rangle = m\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,(\frac{\partial\psi^{*}}{\partial t} + \psi(x,t) + \psi^{*}x\frac{\partial\psi}{\partial z})$$

لاحظ أنه لا يوجد $\frac{dx}{dt}$ تحت التكامل. فقط $\psi(x,t)$ هي التي تتغير بالزمن، وهذا التغير هو الذي يؤدي إلى التغير في $\langle x\rangle$ مع الزمن.

وبما أن بالتعويض في آخر معادلة.

$$i\mathbf{h}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\mathbf{h}}{2m}\frac{\partial\psi}{\partial x^{2}}$$

$$m\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\mathbf{h}}{2i}\frac{\partial^{2}\psi}{\partial x^{2}}$$

$$m\frac{\partial\psi^{*}}{\partial t} = \frac{\mathbf{h}}{2i}\frac{\partial^{2}\psi^{*}}{\partial x^{2}}$$

$$\langle p\rangle = \frac{\mathbf{h}}{2i}\int_{-\infty}^{+\infty}(\frac{\partial^{2}\psi^{*}}{\partial x^{2}}x\psi - \psi^{*}x\frac{\partial^{2}\psi}{\partial x^{2}})dx$$

$$\frac{\partial^{2}\psi^{*}}{\partial x^{2}}x\psi = \frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}x\psi\psi - \frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}\psi - \underbrace{\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}x\frac{\partial\psi}{\partial x}}_{\frac{\partial x}{\partial x}\psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial x}}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}x\psi\psi - \frac{\partial}{\partial x}(\psi^{*}\psi) + \psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$-\frac{\partial}{\partial x}(\psi^{*}x\frac{\partial\psi}{\partial x}) + \psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi^{*}x\frac{\partial^{2}\psi}{\partial x^{2}}$$

وعليه فإن الحد الذي يقع داخل التكامل يصبح.

$$\frac{\partial^{2}\psi^{*}}{\partial x^{2}}(x\psi x - \psi^{*}x\frac{\partial^{2}\psi}{\partial x^{2}} = \frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}x\,\psi) - \frac{\partial}{\partial x}(\psi^{*}\psi) + \psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$-\frac{\partial}{\partial x}(\psi^{*}x\frac{\partial\psi}{\partial x}) + \psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}x\psi - \psi^{*}\psi^{-}\psi^{*}x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right] + 2\psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$\langle p\rangle = \frac{\mathbf{h}}{2i}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}[\qquad] + \frac{\mathbf{h}}{2i}\int_{-\infty}^{+\infty} 2\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\,dx$$

$$\langle \underline{p}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\psi^*(x,t)\frac{\mathbf{h}}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)$$

هذه المعادلة تقترح أن كمية الحركة يمكن أن تمثل بالمؤثر operator.

$$p = \frac{\mathbf{h}}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

ولهذا، على سبيل المثال.

$$\langle p^2\rangle = \int dx\psi^*(x,t)(-\mathbf{h}^2\frac{\partial^2}{\partial x^2})\psi(x,t)$$

وبشكل عام. $\langle f(p)\rangle = \int dx\psi^*(x,t)\; f(\frac{\mathbf{D}}{t}\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,t)$

وبهذا التمثيل لكمية الحركة يمكننا مناقشة المدلول الفيزيــائي لــــ $f(p)$ التي تظهر في المعادلة الدالة الموجية في فراغ كمية الحركة.

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\mathbf{D}h}}\int ap\,\varphi(p)e^{i[px-(p/2m)t]/\mathbf{h}}$$

أولاً: دع $t = 0$ وذلك لأن $\varphi(p)$ لا تعتمد على t.

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\mathbf{D}h}}\int ap\,\varphi(p)e^{ipn/\mathbf{h}} = \sqrt{\frac{\mathbf{h}}{1\mathbf{D}}}\int ou\,\varphi(\mathbf{hD})e^{ikv}$$

وباستخدام معكوس تكامل فورير

$$f(\mathbf{hD}) = \int axy(x)e^{-ikx}$$

or

$$\otimes\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\mathbf{D}h}}\int ax\,\psi(x)e^{-ipx/\mathbf{h}}$$

$$\Rightarrow \int ap\,f^*(p)f(p) = \int ap\,f^*(p)\frac{1}{\sqrt{2\mathbf{D}h}}\int ax\,\psi(x)e^{-ipx/\mathbf{h}}$$

$$= \int ax\,\psi\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\mathbf{D}h}}\int ap\,f^*e^{-ipx/\mathbf{h}}}_{y^*}$$

$$= \int ax\,\psi\psi^* = 1$$

وهذه النتيجة تسمى بنظرية بارسيفال Parsevali

ومنطوقها: لو أن دالة معايرة لـــ 1: فإن تحويل فورير للدالة يكون معاير كذلك If a function is normalized to 1, 50 is its Fourier Transform

(عندنا تمثيلان للدوال: تمثيل x، تمثيل p regasrauney).

خذ:

$$\langle p\rangle = \int ax\,\psi^*(x)\frac{\mathbf{h}}{i}\frac{d}{dx}\psi(x)$$
$$= \int ax\,\psi^*(x)\frac{\mathbf{h}}{i}\frac{d}{dx}\frac{1}{\sqrt{2D\mathbf{h}}}\int ap\,\varphi(p)e^{ipx/\mathbf{h}}$$
$$= \int ap\,\varphi(p)\,p\,\frac{1}{\sqrt{2D\mathbf{h}}}\int ax\,\psi^*(x)e^{ipx/\mathbf{h}}$$
$$\langle p\rangle = \int ap\,\varphi(p)\,p\,\varphi^*(p)$$

وهذه النتيجة تعني أن $\varphi(p)$ تفسير بأنها الدالة الموجية في فـــراغ كميـــة الحركة بـــ $|\varphi(p)|^2$ تعطينا كثافة احتمال إيجاد الجسم الذي كمية حركته p.

في فراغ كمية الحركة x لها التمثيل $x = i\mathbf{h}\frac{\partial}{\partial p}$ ستجد فيما بعد أن المؤثرات ogenatrs تلعب دوراً مهماً في ميكانيكا الكم.

والآن سنوضح بعض خصائصها.

على عكس الأرقام العادية المؤثرات ليست بند دائماً، لو عرفنا

$$[A_1 B] = AB - BA$$

حينئذ:

$$[p,x]\,\psi(x,t) = \frac{\mathbf{h}}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\,\psi(x,t) - x\frac{D\partial}{i}\frac{\psi(x,t)}{\partial x}$$
$$= \frac{D}{i}\left(x\frac{\partial y}{\partial x} + y\,(x,t) - x\frac{\partial y}{\partial x}\right)$$
$$[p,x]\,\psi(x,t) = \frac{\mathbf{h}}{i}\,\psi(x,t)$$

وعليه نقول أننا عندنا علاقة التبديل Commutation relatively

$$[p,x]=\frac{\hbar}{i}$$

مثال: خذ جسم الذي دالته المعايرة normalized ware fumets

$$\psi(x) = 2\alpha\sqrt{\alpha}\, v e^{-\alpha v} \quad v>0$$
$$= \quad v<0$$

(a) لأي قيم من n تكون $p(x)=|\psi(x)|^2$ في القيمة؟

(b) احسب $\langle v^2\rangle, \ \langle v\rangle$

(c) ما قيمة احتمال أن الجسم يوجد بين $v=1/a \ , v=0$

(b) احسب $\varphi(p)$ واستخدم النتيجة لحساب $\langle p^2\rangle \ , \ \langle p\rangle$

أولاً: قيمة p (x) تحدث عندما $\frac{a p}{ax}=o$

$$\Rightarrow = \frac{a}{ax}(\psi\psi^*) = \frac{a}{ax}(2\alpha\sqrt{\alpha 2}\, e^{-\alpha v} * 2\alpha\sqrt[x]{\alpha}\, e^{-\alpha v})$$
$$= \frac{a}{ax}\ (4\alpha^3 x^2 e^{-2\alpha\alpha}) = 0$$
$$= (-2\alpha e^{-2\alpha\alpha} v^2 + e^{-2\alpha\alpha}\, 2v) = 0$$
$$= 2v\,(1-2\alpha v) e^{-2\alpha\alpha} = 0$$
$$\Rightarrow 1 = 2xn \Rightarrow v = \frac{1}{\alpha}$$

(b) $\langle v\rangle = \int_0^\infty dxy^*(x) vy(x) = \int_0^\infty 2a\sqrt{a}\, v e^{-av\cdot} v.2\sqrt{a}\ e^{-ax}$

$$= \int_0^\infty 4a^3 v(v^2 e^{-2av}) dx = \int_0^\infty ax.v\,(4a^3 v^2\ e^{-2ax})$$

عوض عن $y = 2a\,v,\ dy = 2av\ ,\ dy = 2a\ ax \Rightarrow ax = \frac{1}{2}dy, x = \frac{1}{2a}y$

$$\langle v\rangle = \frac{1}{4a}\int_0^\infty dy\, y^3 e^{-y} = \frac{3i}{4a} = \frac{3}{2a}$$

$$\int_0^\infty t^n e^{-t} dt = t^n e^{-t}\int_0^\infty + n\int_0^\infty t^{n-1} e^{-tdt} = \int_0^\infty t^n e^{-t}\, at = \Gamma(n+1) = n!$$

n is aminke $\Gamma(n+1) = n(n-1)(n-2)........1 = n!$

$$\langle a^2 \rangle = \int_0^\infty dy\, y^2 (4a^3 x^2 e^{-2ax}) = \frac{4i}{8a^2} = \frac{3}{a^2}$$
$$=$$

(واصل المحاضرة) الأخيرة (السؤال في المنتصف):

واصل خواص المؤثرات:

ظهور المؤثرات p بـ I ممكنه أن يؤدي إلى الشدة في أن $\langle p \rangle$ كمية حقيقية ولكننا يمكننا مراجعة هذه الحقيقة أن p كمية حقيقية.

$$\langle p \rangle - \langle p \rangle^\alpha = \int ax\, \psi^* \frac{h}{i}\frac{\partial \psi}{\partial x} - \int ax\, \psi \left(-\frac{h}{i}\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$$
$$= \frac{h}{i}\int ax\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi\right)$$
$$= \frac{h}{i}\int ax \frac{\partial}{\partial x}(\psi^* \psi) = 0$$

بشرط أن الدالة تتلاشى عند ∞، وهذا الشرط متحقق في الدوال في مربعة التكامل ولكن إذا لم يتحقق هذا الشرط، مثلاً في حالة الدوال التي تغير نفسها Periodical

$$\psi(x) = \psi(x+L)$$

ولو قصرنا أنفسنا للعمل في $0 \le v < L$ عند $\frac{t\partial}{lax}$ لازال يكون مؤثر هيرومتي hermitical poetry

$$\langle p \rangle - \langle p \rangle^* = \frac{h}{i}\int_0^L ax \frac{\partial}{\partial x}(\psi^*(x)\psi(x))$$
$$= \frac{h}{i}|\psi(L)|^2 - \frac{h}{i}|\psi(o)|^2 = 0$$

المؤثر الذي قيمته المتوقعة لكل القيمة المسموحة للدالة الموجية تكون حقيقية يسمى lerimti of opener، وعليه فإن p مثل x هو مؤثر هيرمتي.

An operator whose expectation value for all admissible wave functims is real is called a hermitical operator

ولعلنا نستنتج هذا الفصل بملاحظة أن المعادلة:

$$i\hbar = \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$$

بالتعريف: $p_{op} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ يمكن كتابتها بالصورة التالية:

$$i\hbar = \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{p_{op}^2}{2m}\psi(x,t)$$

المؤثر على الجانب الأيمن هو الطاقة لجسم حر. ولو عممنا هذا الجـــسم في جهد، نتحصل على:

$$i\hbar = \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left[\frac{p_{op}^2}{2m} + V(x)\right]\psi(x,t)$$

or

$$i\hbar = \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(x,t)$$

or

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \underline{\underline{H}}\,\psi(x,t)$$

حيث H هو مؤثر الطاقة. ويسمى عادة الهاملتونيان Hamiltonian لأنـــه صورة مؤثرة للدالة هاملتونيان الميكانيكا التقليدية.

وبما أن p هو مؤثر هيرميتي $p^2 \Leftarrow$

$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ جهد حقيقي

س/ الدالة المعطاة:

$$\psi(x)=\frac{N}{x^2+a^2}$$

(a) احسب N اللازمة المعايرة الدالة ψ.

(b) استخدام الدالة ψ لحساب $\langle v^n\rangle$، ما قيم n التي تؤدي إلى تكامل متجمع.

(c) احسب $\langle p^2\rangle$ باستخدام الدالة الموجية في فراغ كمية الحركة.

(a) احسب

$$\Delta x=\sqrt{\langle x^1\rangle-\langle x^2\rangle}$$

$$\Delta x=\sqrt{\langle p^1\rangle-\langle p^2\rangle}$$

لحساب $\Delta x\,\Delta p$ ؟

$$N^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{(x^2+a^2)^2}=1 \qquad \int_{0}^{\infty}\frac{dx}{(a^2+x^2)^n}=\frac{\mathbf{D}(2n-3)!}{2a^{2n-1}(2n-2)!}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dx}{(x^2+a^2)}=\left[\frac{x}{2a^2(x^2+a^2)}+\frac{1}{2a^3}+tu^{-1}\left(\frac{x}{a}\right)\right]_{-\infty}^{+\infty}$$

$$=\frac{\mathbf{D}}{2a^3}\Rightarrow N=\sqrt{\frac{2a^3}{\mathbf{D}}}$$

$$\therefore\psi=\sqrt{\frac{2a^3}{\mathbf{D}}}\;\frac{1}{x^2+a^2}$$

(b)

$$\langle x^n\rangle=\frac{2a^2}{\mathbf{D}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{a^2}{(x^2+a^1)^2}$$

تتقارب $\langle x^n\rangle$ فقط عندما $n<3$

$\Leftarrow\quad n=0,1,2,$

المكامل لزوايا $\langle x^n\rangle=0$

$$\langle x^n \rangle = \frac{2a^3}{\mathbf{D}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2}{(x^2+a^2)^2} dx$$

$$\int \frac{x^2\, ax}{(x^2+a^2)^2} = \left[\frac{x}{2(x^2+a^2)} + \frac{1}{2a} + \tan^{-1}(x/a)\right]_{-\infty}^{+\infty}$$

$$= \mathbf{D}/2a \qquad , \qquad \langle n^2 \rangle = 2a^2$$

$$\varphi(p) = \frac{N}{\sqrt{2\mathbf{Dh}}} \int ax \quad e^{-2p\,x/\mathbf{h}}$$

$$= \frac{a}{\mathbf{D}} \sqrt{\frac{a}{\mathbf{h}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx\, e^{-i\,px/\mathbf{h}}}{x^2+a^2} \quad p = \mathbf{h}k \rightarrow p/\mathbf{h} = k$$

للتكامل نستخدم كونتور نصف دائرة في المستوى المركب $Z = x\,tiy$

$$= 2\mathbf{D}\, i\, R(-ia)$$

$$= \frac{2\mathbf{D}i}{2ia} e^{-k(-ik)} = \frac{\mathbf{D}}{a} e^{-ka}$$

$$\varphi(p) = \sqrt{\mathbf{D}/\mathbf{h}} \quad e^{-pa/\mathbf{h}} \qquad p > 0$$

$$= \sqrt{a/\mathbf{h}} \quad e^{-pa/\mathbf{h}} \qquad p > 0$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2a}{\mathbf{h}} \int_0^{\infty} p^2\, e^{-pa/\mathbf{h}}\, ap$$

$$\langle p^2 \rangle = \int \varphi^*\, p^2\, \varphi\, ap$$

$$\frac{ap}{\mathbf{h}} = z \qquad p^2 = z^2 \frac{\mathbf{h}^2}{a^2}$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2a}{\mathbf{h}} \left(\frac{\mathbf{h}}{a}\right)^3 \int_0^{\infty} z^2\, e^{-z}\, az$$

$$= 2\left(\frac{\mathbf{h}^3}{a}\right) \quad \Gamma(3) \quad = 4\left(\frac{\mathbf{h}}{a}\right)^2$$

$$\Gamma(n+1) = n!$$

$$\Gamma(2+1)\ 2!$$

$$\langle p \rangle = 0 \qquad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$$

$$\Delta p = 2\mathbf{h}/a \qquad \Delta x = \sqrt{\langle \Delta x \rangle}$$

س/ لو أن الدالة الموجية تحقق الشرط $\psi(\mathbf{D})=\psi(-\mathbf{D})$ أثبت أن المؤثر.

$$\angle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\theta}$$

مؤثر هيرميتي

لإثبات هذا يجب أن $\langle\angle\rangle - \langle\angle\rangle^* = 0$

$$\langle\angle\rangle = \int_{-D}^{D} d\theta\, \psi^*(\theta)\frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\theta}\psi$$

$$\langle\angle\rangle^* = -\int_{-D}^{D} d\theta\, \psi\,\frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\theta}\psi^*$$

$$\langle\angle\rangle - \langle\angle\rangle^* = \frac{\hbar}{i}\left[\int_{-D}^{D} d\theta\,(\psi^*(\theta)\tfrac{d}{d\theta}\psi) + (\psi\tfrac{d}{d\theta}\psi^*)\right]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\int_{-D}^{D} d\theta\,\frac{d}{d\theta}(\psi^*\psi)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left[\psi_{(D)}^{\ *}\,\psi_{(D)} - \psi^*(-D)\,\psi(D)\right]$$

$$y(\mathbf{D}) = y(-\mathbf{D})$$

$$= 0$$

∴ المؤثر $\langle\angle\rangle = \langle\angle\rangle^*$

$$3.c.\qquad \int_{-\infty}^{\infty} dk\, N^2 = N^2\int_{-k/2}^{k/2} dk = N^2 k = \frac{1}{2D} \Rightarrow \quad N = \sqrt{\frac{1}{2Dk}}$$

وعليه فإن قيم N في الحالتين متساوية.

عرض الدالة من الجزء (p) يمكن تقديره بالمسافة بين نقطتين عندها $\sin\frac{kx}{2}$ تختفي 3.d وهذا يحدث عند:

$$\sin\frac{kx}{2} = 0 \begin{cases} x = +\frac{2D}{k} \\ x = -\frac{2D}{k} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Delta x = \frac{4D}{k}, \qquad \Delta k = \frac{k}{2} - (-\frac{u}{2}) = k$$

$$\Rightarrow \Delta x . \Delta k = \frac{4D}{k} . \ k = 4D$$

وهي نتيجة لا تعتمد على k.

الدوال الخاصة والقيم الخاصة: Eigenfunctions and Eigenvalues

لو أخذنا معادلة شرودنجر التي تعتمد على الزمن:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+v(x)\psi(x,t) \qquad (1)$$

ولحل هذه المعادلة نقصها لمعادلتين نق

$$\psi(x,t)\ ,\ T(t)u(x)$$

$$\Rightarrow i\hbar\, u(x)\frac{dT(t)}{dt}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2}+v(x)^{u(x)}\right]$$

بالقسمة على u (x) T (t)

$$\Rightarrow i\hbar\,\frac{dT(t)dt}{T(t)}=\frac{(\sin\ 1/2m)(a^2u(x)/dx^2)+V(x)u(x)}{u(x)}$$

وهذا كمية يمكن تحقيقه فقط افتراض أن كلا الطرفين يساوي ثابت والذي نسميه E

$$\Rightarrow i\hbar\frac{dT(t)}{dt}=E\,T(t)\Rightarrow\int\frac{dT(E)}{T(E)}=\int-\frac{i1}{i\hbar}E\,dt=-\frac{i}{\hbar}Et$$

$$\ln T(t)=-\frac{i}{\hbar}Et\Rightarrow T(t)=Ce^{-\frac{i}{t}ET}$$

والمعادلة الثانية:

$$-\frac{\hbar 2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2}+v(x)u(x)=Eu(u)$$

معادلة شرودنجر الغير معتمدة على الزمن: time indgader S-E وهـــذه المعادلة تفرق عن (1) والتي تصف التغير الزمني للدالة $\psi(x,t)$ معادلة هي دالة خاصة. Ligea valu equation. ولفهم ماذا يعني هذا الكلام دعنا نعـــدد مـــرة أخرى لمفهوم المؤثرة.

بشكل عام مؤثر ما: يؤثر على دالة ويأخذها لدالة أخرى، مثال على ذلك:

1. $\text{of}\ (x)=f\ (x)+x^2$
2. $\text{of}\ (x)=[f\ (x)]^2$
3. $\text{of}\ (x)=f\ (3x^2+1)$
4. $\text{of}\ (x)=\left[\dfrac{d\,f\ (x)}{dx}\right]^3$
5. $\text{of}\ (x)=df/dx-2f\ (x)$
6. $\text{of}\ (x)=\lambda f\ (x)$

كل هذه الأمثلة تؤثر في الخاصية هي بإعطاء دالة $f\ (x)$ توجد قاعدة التي تحدد $\text{of}\ (x)$ لنا.

يوجد نوع خاص من المؤثرات يسمى المؤثرات الخطية.

وهذه المؤثرات له الخاصية:

$$\angle[f_1\ (x)+f_2\ (x)]=\angle[f_1\ (x)+\angle f_2\ (x)]$$

وبوجود c كرقم موجب اختياري.

ملاحظة: يوجد مؤثرات عكسية الخطية ولها $\angle cf(x)=c^*\angle f(x)$

$\angle cf\ (x)=c^*\angle f\ (x)$ وعليه فإنه في القائمة السابقة فإن المؤثرين الأخيرين همـــا الخطيان.

المؤثر الخطي سينقل دالة ما لدالة أخرى.

$$\angle f\ (x)=\frac{df\ (x)}{ax}-2\ f\ (x)$$

ويمكننا تشبه الدوال كمتجهات في ثلاثة أبعاد وتأثير المؤثرات يكون بنقل (تحويل) المتجه لمتجه آخر، ويأخذ المتجه كوحدة (amitvedre) ومـــؤثر ينقـــل نقطة على sphere unit لنقطة أخرى ومؤثر ما يمكن اعتبـــاره بقابـــل دوران النقطة حول محور z بثلاثين 30°.

ثلاث حالات: $A\rightarrow A'$

$$B \to B'$$

$$C \to C'$$

لاحظ أن النقطة على القطب تنقل على نفسها (وكذلك النقطة التي على القطب الجنوبي) وهذه الحالة الخاصة لمثال مؤثر مثل معادلة (6 – 4) والذي يمكن كتابته كما يلي:

$$H \left| u_E(x) \right| = E \left| u_E(x) \right| \tag{4-10}$$

منطوق المعادلة: H، مؤثر الهاملتيونيان يؤثر على نوف معين من الدوال سيعطينا من جديد الدالة التي يؤثر عليها مضروبة في ثابت.

هذا الثابت يسمى eigeulalw ومن المعادلة يعتمد على E وحل المعادلة يعتمد على E.

وحل المعادلة $u_E(x)$ يسمى eigeufaction الذي يناظر القيمة الخاصة E للمؤثر H.

مثال: حل مسألة القيمة الخاصة $\angle f(x) = \lambda f(x)$

حيث:

$$\angle f(x) = \frac{h}{i}\frac{df(x)}{ax} - \beta x f(x)$$

في المنطقة $a \le x \le a$ ولها شرط الأطراف (الشروط الحدية) bouday.

$$f(a) = f(-a)$$

الحل:

$$\angle f\ (x) = \lambda\ f\ (x)$$

$$\frac{\mathbf{h}}{i}\frac{a\,f\,(x)}{a\,x} - \beta\,v\,f\,(x) = \lambda\,f\,(x)$$

$$\frac{df\,(x)}{d\,x} = \frac{i}{\mathbf{h}}[\beta + t\,(x) + \lambda\,f\,(x)] = \frac{i}{\mathbf{h}}\,[\beta\,x + \lambda] + (x)$$

$$\frac{df}{f} = \frac{i}{\mathbf{h}}(\beta^{x} + \lambda)\,ax$$

$$h\,f = \frac{i}{\mathbf{h}}(\beta\frac{x^{2}}{2} + \lambda^{x}) + c$$

$$i\beta^{x}\,{}^{2}\!/_{2} + i\lambda\lambda x\mathbf{h}$$

$$f_{(x)} = Ae$$

القيمة الخاصة للمؤثر H تسمى قيم الطاقة الخاصة energy eigenvahes

$$H = \frac{p^{2}op}{2m} + V\,(x)$$

مسألة القيمة الخاصة لجسم في صندوق the Eigenvalne Poeem for a Particle in box.

باعتبار (4 – 6)

$$-\frac{\mathbf{h}^{2}}{2m}\frac{a^{2}u\,(x)}{ax^{2}} + V\,(x)\,u\,(x) = Eu\,(x)$$

حيث:

$$V\,(x) = \infty \qquad x < 0$$
$$= 0 \qquad {}^{\circ} < x < a$$
$$= \infty \qquad a < x$$

من (6 – 4):

$$u\,(x) = 0 \qquad x < 0$$
$$= 0 \qquad a < x$$

داخل الصندوق حيث V (x) = 0 المعادلة (6 – 4).

$$\frac{d^{2}u\,(x)}{dx^{2}} + \frac{2mE}{\mathbf{h}^{2}}\,u\,(x) = 0$$

لون أن E < 0، المعادلة تأخذ الشكل.

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - K^2u(x) = 0 \quad , \quad k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

الحل العام هو إتحاد خطي من $e^{kx} \quad , \quad e^{-lx}$

$\Leftarrow$ بقيم إيجابية E, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + k^2 u(x) = 0$$

الحالة العام A sin Kx + B con lex

ولكن لزوم 0 = u (0)

يحصرنا لاختيار الشرط:

$$\begin{aligned}
&u(x) = A\sin k \\
&u(a) = 0 \\
&\Rightarrow \\
&\Leftarrow ka = n\pi \qquad n = 1, 2, 3.........
\end{aligned}$$

وعليه فإن قيم الطاقة الخاصة.

$$En = \frac{\hbar^2 u^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 u^2}{2ma^2} \qquad n = 1, 2, 3.........$$

وبإمكاننا اختبار أن الحلول معايرة لو كانت قيمة.

$$\begin{aligned}
&A = \sqrt{2la} \\
&u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{h\pi x}{a}
\end{aligned}$$

والحلول لها الخاصية.

$$\begin{aligned}
\int_0^a dx\, u_n^*(x) u_m(x) &= \int_0^a dx \frac{2}{a} \sin\frac{n\pi\chi}{a} \sin\frac{m\pi x}{a} \\
&= \frac{1}{a}\int_0^a \left\{\cos\left(\frac{(n-m)\pi x}{a}\right) - \cos\left(\frac{(n+m)\pi x}{a}\right)\right\} \\
&= \frac{\sin (n-m)\pi}{(n-m)\pi} - \frac{\sin (n+m)\pi}{(n+m)\pi} \\
&= 0 \qquad \text{whem} \quad n \pm m \\
&= 1 \qquad \text{whem} \quad n = m
\end{aligned}$$

$$\int_0^a dx\, u_n^*(x)\, u_m(x) = smn \qquad ....(4-23)$$

* وهذا يعني أن الدوال الخاصة المناظرة لقيم خاصة مختلفة تكـون متعامـدة ortagoral.

* لو أن الدوال الخاصة معايرة. بدقة، كما هو ظـاهر مـن (4-23)، يـسمى thonormality covelition شرط التطبيع و التعامد.

استنباط بعض المعلومات الفيزيائية من الحلول الخاصة eigensalutions.

1- الحالة التي لها أقل طاقة، الحالة الدنيا grourdstate، توصـف بــ $u_1(x)$ وتقابلها القيمة الخاصة.

$$E_1 = \frac{D^2 h^2}{2ma^2}$$

لاحظ أنه من الميكانيكا التقليدية أن أقل طاقة لجسم ساكن atesr في فجوة، له $V(x)=0\,,\,p=0$ فإن مجموع طاقة الوضع وطاقة الحركة = 0 ولكن نجد في ميكانيكا الكم أن أقل طاقة قيمتها ليست صفر أي توجد قيمة "للطاقة الدنيا" هـذا مرتبط بمبدأ اللاتحديد $\Delta n\, \Delta p \geq D$ لماذا.

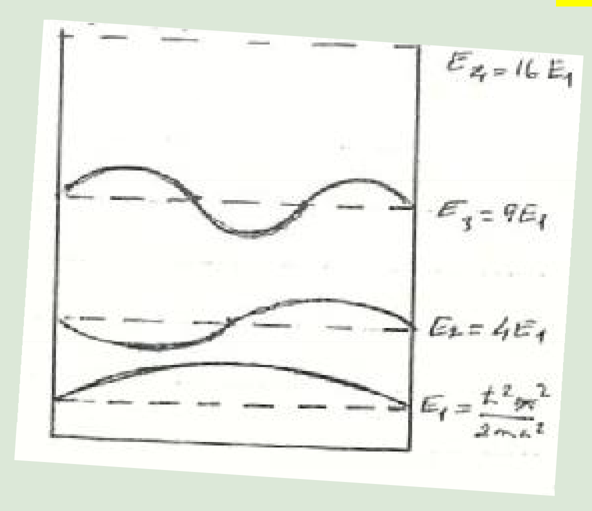
2- بما أن الحلول حقيقية فإن $\langle p \rangle = 0$ وذلك لأن لأي دالة حقيقيـة $R(x)$ قيمـة تخيلية $\int dx\, R(x) \frac{h}{l} \frac{d}{dx} R(x) \Rightarrow$ وهذا لا يتفق مع المطلوب $\langle p \rangle = \langle p \rangle^x$ إلا في حالـة أن $\langle p \rangle = 0$ من ناحية أخرى فإن $\langle p^2 \rangle \neq 0$

وبما أنه في داخل الصندوق $p^2 = 2mE$

$$\langle p^2 \rangle = 2mE_n$$

3- وبازدياد عدد العقد في الحل، فإن هذا يقابل طاقة أعلى كما هو موضح في الشكل التالي هذا يمكن فهمه وذلك لأن طاقة الحركة تزداد بـــ urith caruature of the solntions القيمة المتوقعة لطاقة الحركة.

$$\langle u \rangle = \frac{\mathbf{h}^2}{2m} \int dx\, u^*(x) \frac{d^2 u(x)}{d x^2}$$



فرضية الفك:

The Expansion Postulate and its physical Interpretation

نظرية فورير تنص على أن أي دالة $\psi(x)$ التي تحقق الــشرط الحــدي $\psi(0)$ and $\psi(a)=0$ يمكن كتابتها.

$$\psi(x)=\sum Cu \sin \frac{n\mathbf{D}x}{a}$$

وبما أن الدوال الخاصة (المميزة) لــــ H $\left|\quad\right|$ تتناســب مــع $\sin \frac{n\mathbf{D}x}{a}$ فبإمكاننا كتابة الدوال الخاصة لــ $U_n(x)$ كالتالي:

$$\psi(x) = \sum A_n U_n(x)$$

ومن شرط التعامد و المعايرة فإنه بإمكاننا إيجاد A_n؟

$$\int_0^a dx\, u_m^*(x)\ \psi(x) = \int_0^a dx\, u_m^*(x)\ \sum A_n U_n(x)$$

$$= \sum A_n \int_0^a dx\, u_m^*(x) = \sum A_n\, Smn$$

$$A_n = \int_0^a dx\, u_m^*(x)\ \psi(x)$$

مثال/ اعتبر جسيم في صندوق. دالته الموجية تعطي بـــ

$$\psi(x) = A(x/a) \qquad 0 < x < a/2$$

$$= A(1-\frac{x}{a}) \qquad a/2 < x < a$$

حيث $A = \sqrt{\frac{12}{a}}$ لكي تحقق $\int_0^a dx\ |\psi(x)|^2 = 1$

احسب احتمال أن قياس الطاقة يعطينا الدالة الخاصة E_n ؟

نحن نريد حساب A_n في الفك.

$$A_n = \int_0^a dx\ \psi(x) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\mathbf{D}x}{a}$$

$$A_n = \int_0^a dx\ \psi(x) \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \sin \frac{n\mathbf{D}x}{a}$$

$$= \mathbf{Q}\ A = \sqrt{\frac{12}{a}}$$

$$A_n = \int_0^{a/2} dx\ A\frac{x}{a} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\mathbf{D}x}{a} + \int_{a/2}^{0} dx\,(A\left[1-\frac{x}{a}\right]) \sin \frac{n\mathbf{D}x}{a}$$

$$= \frac{\sqrt{24}}{a}\left[\int_0^{a/2} dx\ (\frac{x}{a}) \sin \frac{n\mathbf{D}x}{a} + \int_{a/2}^{0} dx\,(1-\frac{x}{a}) \sin \frac{n\mathbf{D}x}{a} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \sin \frac{n\mathbf{D}x}{a}\right]$$

$$A_n = \frac{\sqrt{24}}{a} \int_0^{\mathbf{D}/a}$$

$$A_n = \frac{\sqrt{24}}{a} \int_0^{\mathbf{D}/a} an \frac{u}{\mathbf{D}} \sin\ nu\ (1-(-1)^n)$$

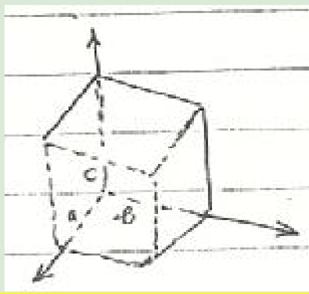
N ← قيمة A_n ← 0 وذلك لوجود الحد الثاني التكامل يمكن حسابه بـــسهولة، فقط لقيم فردية.

$$An = \frac{\sqrt{24}}{\mathbf{D}} 2 \frac{1}{\pi n^2} (-1)^{n+1}$$

$$A_n = \frac{a6}{\mathbf{D}^4 n^4} \qquad n \text{ odd}$$

$$= 0 \qquad n \text{ euen}$$

مثال/ في حالة وجود جسيم داخل صندوق (3 أبعاد) من خـــلال الحــل الـــذي توصلنا إليه في حالة بعد واحد.



$$u_a = n\mathbf{D} \Rightarrow u = \frac{n\mathbf{D}}{a} \Rightarrow p = \mathbf{h}u = \mathbf{h}\frac{n\mathbf{D}}{a}$$

$$\Rightarrow p_x = \frac{\mathbf{Dh}n_x}{a} \ , \ p_y = \frac{\mathbf{Dh}n_y}{b} \ , \ p_z = \frac{\mathbf{Dh}n_z}{c}$$

$$E = \frac{1}{2m}p^2 = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{\mathbf{D}^2\mathbf{h}^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right)$$

هذه المعادلة تعطي مستويات الطاقة لجسيم في صندوق جهد في ثلاثة أبعاد.

$$\psi = C \sin\frac{n_x \mathbf{h}x}{a} \quad \sin\frac{n_x \mathbf{h}y}{b} \quad \sin\frac{n_x \mathbf{h}z}{c}$$

لو عوضنا بهذه المعادلة في معادلة سترودنجر فنتحــصل علـــى قـــيم E أعلاه.

في حالة مكسب (a = b = c).

$$E = \frac{\mathbf{D}^2\mathbf{h}^2}{2m}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\mathbf{D}^2\mathbf{h}^2}{2m^2}k^2$$

والدالة الموجبة التي تقابلها.

$$\psi = C \sin\frac{n_x \mathbf{h}x}{a} \quad \sin\frac{n_x \mathbf{h}y}{b} \quad \sin\frac{n_x \mathbf{h}z}{c}$$

لاحظ أن الطاقة تعتمد على n^2. هذا يعني أن كل الحالات التي تناظر كل الأرقام D, n_y, n_z والتي تعطي نفس الطاقة. ولكن عندما نغير الأرقـــام n_x, n_y, n_z بدون ما نغير قيمة n فإن Ψ تتغير وعليه فإنه يوجد مستويات من الطاقـــة لهـــا العديد من الدوال الموجية وهذا ما يسمى بالتكرار degeneracy.

الطاقة	n_x, n_y, n_z	g
$3E_1$	(1,1,1,)	1
$6E_1$	(2,1,1) (1,2,1) (1,1, 2)	2
$9E_1$	(2,2,1) (2,1,2) (2,2, 2)	3
$11E_1$	(3,1,1) (	

فرضية الفك:

Expansion Postulate and Its physical Interpretation

إن نظرية فورير تنص على أن أي دالة $\psi(x)$ التي تحقق الشروط الحدية $\psi(0) = \psi(a) = 0 \Leftarrow$ bowdary canditions يمكن كتابتها بالشكل التالي.

$$\psi(x) = \sum Cu \sin \frac{n\mathbf{D}x}{a}$$

وبما أن الدوال الخاصة لــ H للبئر اللانهائي infinite well تتناسب مـــع $\sin \frac{n\mathbf{D}x}{a}$ فبإمكاننا كتابة المعادلة السابقة بدلالة الدوال الخاصة لــ $U_n(x)$

$$\psi(x) = \sum A_n U_n(x)$$

وباستخدام علاقة المعايرة $\int_0^a dx\, u^*_m(x) u_n(x) = smn \leftrightarrow$ orthonormelnty

يمكننا إيجاد قيمة An.

$$\int_0^a dx\, u_m^*(x)\ \psi(x) = \int_0^a dx\, u_m^*(x) \sum A_n U_n(x)$$

$$= \sum A_n \underbrace{\int_0^a dx\, u_m^*\, u_n(x)}_{Smn} = \sum A_n\, Smn$$

$$A_n = \int_0^a dx\, u_m^*(x)\ \psi(x)$$

$$\Rightarrow A_n = \int_0^a dx\ \ u_n^*(x)\ \psi(x) \qquad , \qquad \sin = 1, \text{if } m = n$$

وكما فعلنا في حالة انتشار الحزمة الموجية الحرة، بإمكاننا حساب التطور الزمني لهذه الدالة الاختيارية $\psi(x)$ مع الزمن. وبما أن كل من الدوال الخاصة $U_n(x)$ تتطلب دالة اعتماد على الزمن خاصة بها $(e^{-iEnt/\hbar})$، بشكل عام يمكننـــا كتابة.

$$\psi(x,t) = \sum A_n U_n(x)\ e^{-iEnt/\hbar}$$

ولتأويل المعاملات A_n فبإمكاننا حساب القيمة المتوقعة للطاقة في أي حالة اختيارية (x) وبما أن داخل الصندوق $H = p^2/2m$، وخارج الـــصندوق $\psi(x) = 0$ وبما أن $H\,U_n(x) = E_n\,U_n\ (x)$

$$\langle H \rangle = \int_0^a dx\,\psi^*(x)\,H\psi(x) = \int_0^a dx\,\psi^*(x)\,H \sum A_n U_n(x)$$

$$= \sum A_n \int_0^a dx\,\psi^*(x)\ E_n U_n(x) \qquad \text{(a)}$$

$$= \sum E_n \int_0^a dx\,\psi^*(x)\ A_n U_n(x)$$

$$= \sum E_n |A_n|^2$$

$$1 = \int_0^a dx\,\psi^*(x) \sum A_n\ U_n(x) \qquad \text{(B)}$$

$$= \sum A_n = \sum |A_n|^2$$

المعادلة السابقة (a) مع شرط التطبيع يقترح أن $|A_n|^2$

$$A_n = \int dx\, U_n^*(x)\, \psi(x)$$

يمكن تأويلها باحتمال أن قياس الطاقة لأي دالـــة $\psi(x)$ يعطينـــا القيمـــة الخاصة E_n.

مثال: خذ جسم في صندوق. دالة الموجة.

$$\psi(x) = A\,(x/a) \qquad 0 < x < a/2$$
$$= A\,(1 - \frac{x}{a}) \qquad a/2 < x < a$$

حيث $A = \sqrt{\frac{12}{a}}$ وذلك لتحقق $\int_0^a dx\, |\psi(x)|^2 = 1$ احسب احتمـــال أن القيـــاس للطاقة يعطينا القيمة الخاصة E_n. نحن نريد أن نحسب A_n في الفك.

$$A_n = \int_0^a dx \underset{\uparrow}{\psi(x)} \sqrt{\frac{2}{a}}\, \sin\frac{nDx}{a}$$
$$\sqrt{\frac{12}{a}\frac{x}{a}}$$
$$\sqrt{\frac{24}{a}} \left[\int_0^{a/2} dx\, (\frac{x}{a}) \sin\frac{nDx}{a} + \int_{a/2}^{0} dx\,(1 - \frac{x}{a}) \sin\frac{nDx}{a} \right]$$

بتغيير المتغيرات $u = \frac{Dx}{a}\ ,\ dx = \frac{a}{D} du$ للتكامل الأول.

للتكامل الثاني $D - u = \frac{Dx}{a}$

$$An = \frac{\sqrt{24}}{a} \int \frac{a}{D} an \frac{u}{D} \sin(nu) + \int$$
$$= \frac{\sqrt{24}}{D} \int_0^{D/2} dn \frac{u}{D} \sin nu\,(1 - (-1)^n)$$

A_n لقيم n مزدوجة $\leftarrow 0$ لأن الحد الأخير ولقيمة n الفردية.

$$An = \frac{\sqrt{24}}{a}\ 2.\ \frac{1}{pn2} (-1)^{n+1}$$

وعليه.

$$\Rightarrow \quad |A\ n|^2 = \frac{96}{D^4 n^4} \qquad n\ odd$$
$$= 0 \qquad neven$$

Momentum Eiglnhetion of the Fremantle

التماثل Parity:

الدوال الخاصة لجسم حر (sin kx, cos kx) وكذلك الدوال الخاصة لجسم في صندوق ممتد من $-a/2 \rightarrow a/2$

$$U_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad (n=2,\ 4,\ 6, \ldots\ldots\ldots)$$

$$U_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} \qquad (n=1,\ 3,\ 5, \ldots\ldots\ldots)$$

هذه الدوال إما أن تكون زوجية أو فردية تحت التغيير $x \rightarrow -x$ لو أخذنا جسم في صندوق متماثل حول $x=0$ وكانت القيم الابتدائية للحالة $\psi(x)$ دوال زوجية.

هذا يعني أن $\psi(x)$ يجب أن تكون $\psi(x) = \sum A_n \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a}$ حيث أن الجمع يمتد على $(n=1, 3, 5, \ldots\ldots\ldots)$ عند وقت آخر تصبح الدالة

$$\psi(x,t) = \sum A_n \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} e^{-iE_n t/\hbar}$$

وهذه الدالة لا زالت زوجية في x عند أوقات أخرى. ونفس الشيء يحدث في حالة القيم الأولى الابتدائية تكون فردية.

وعليه: للصندوق المتماثل ومتمحور حول x = 0 فإن الفردية والزوجية هي خواص لا تعتمد على الزمن. وعليه بأنها (الزوجية والفردية) ثوابت السرعة.

فلو استحدثنا مؤثر p Parihyopenator مؤثر التماثل والذي قاعدته أن يعكس $x \rightarrow -x$ وهكذا لأي دالة موجبة $\psi(x)$

$$p\ \psi(x) = \psi(-x)$$

ولدالة موجية زوجية.

$$p\ \psi^{(+)}(x) = \psi^{(+)}(x)$$

ولدالة فردية.

$$p\ \psi^{(-)}(x) = -\ \psi^{(-)}(x)$$

وهاتين المعادلتين هي معادلات ذات قيم خاصة والذي وضحناه هـذا أن الدوال الزوجية هي دوال خاصة لــ p لها قيمة خاصة 1 + بينما الدوال الفردية هي دوال خاصة لــ p لها قيمة خاصة 1-

وفي مسألة الجسم في صندوق فإن الدوال $\cos(\frac{n\mathbf{D}x}{a})\ ,\ \sin\ (\frac{n\mathbf{D}x}{a})$ ليست فقط دوال خاصة لــ H بل هي دوال خاصة لــ P القيم الخاصـة ± 1 هـي القـيم الممكنة فقط.

افتراض أننا عندنا. $PU(x) = \mathbf{D}\ u(x)$ بالتأثير بـ P مرة أخرى.

$$P^2 U(x) = P\mathbf{D}\ u(x) = \mathbf{D}^2\ u(x)$$

لكن $P^2 U(x) = U(x)$ وذلك لأن لانعكاسية الاثنين (مرتين) يجب ألا يغير شيئاً. $\Rightarrow \lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$ وأي دالة اختيارية يمكننا كتابتها كمجموع لـدوال زوجيـة وفردية.

$$\psi(x) = \frac{1}{2}[\psi(x) + \psi(-x)] + \frac{1}{2}[\psi(x) - \psi(-x)]$$

وهذا كما عملنا بالدوال الخاصة لــ H $\Leftarrow$ أي دالة يمكن أن تفك بدلالـة الدوال للمؤثر الجديد.

إن ظهور "الزوجية" و "الفردية" جاد لأننا ركزنا الصندوق حـول $x = 0$ وإذا كنا وضعناه بين $0\ ,\ a$ لا شيء سيتغير وستبقى التماثل (التنـاظر) تحـت الانعكاس عند $x = a/2$. إن الدرس المطلوب تعلمه هنا هو أننا بوضع مسألة في ميكانيكا الكم يجب أن نراعي باهتمام تماثل وتنـاظر الهاملتونيـان، واختيـار

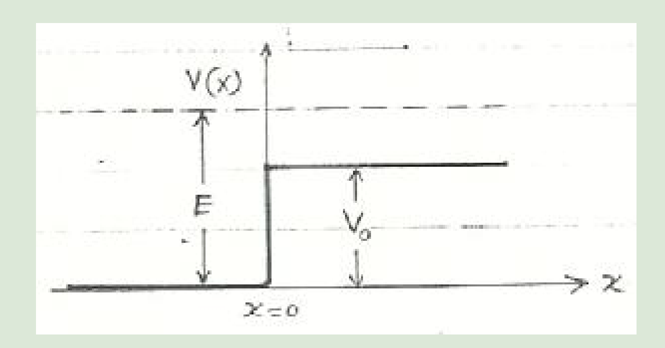
الاحداثيات بطريقة تظهر التماثل بوضوح والحقيقة الهامة هو تماثـل (تنـاظر) الهاملتونيان. هذا ربما أن يرى بوضوح بالسؤال تحت أي حيثيات ستبقى الدالة الزوجية زوجية عند كل الأزمنة.

الجهد ذو البعد الواحد One – Dimensional Potential

في هذا الفصل سوف نحل مسائل بسيطة للحركة في بعـد واحـد. هـذه المسائل ذات أهمية وذلك لأنهـا توضـح بعـض الظـواهر الغيـر تقليديـة nonclaesical efpeots وكذلك لأن العديد من الحـالات الفيزيائيـة هـي فـي محصلتها في بعد واحد بالرغم من أننا نقيس في ثلاثة أبعاد.

عتبة الجهد (معاملي النفاذ والانعكاس) The Potential step:

بالنظر إلى شكل الموضح.



$$V(x) = 0 \qquad x < 0$$
$$= V_0 \qquad x > 0$$

معادلة شرودنجر.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + v(x)\, u(x) = E\, u(x)$$

يمكن كتابتها:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - v(x)\right] u(x) = 0$$

بكتابة:

$$\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V_0\right] = q^2 \qquad , \qquad \frac{2mE}{\hbar^2} = K^2$$

عند $V(x) = 0 \leftarrow x < 0$ فإن الحل العام.

$$u(x) = e^{ikz} + R\,e^{-ikz}$$

وهذا يقابل فيض يتحرك في الاتجاه الموجب لــ x ومقدار الفيض هو:

$$j = \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(x)\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right] =$$

$$= \frac{\hbar}{2im}\left[(e^{iux} + R^* e^{iux})(iue^{2ikx} - Rik\,e^{-iux}) - \overbrace{(ike^{iux} + ikR^* e^{-iux})(e^{iux} + R^* e^{-iux})}^{\text{complex conjugate}}\right]$$

$$\frac{\hbar}{2im}\left\{\left[ik(1 - RR^*) + ik(R^* e^{2ikx} - Re^{-ikx})\right]\right.$$

$$\left. - \left[-ik(1 - RR^*) + ik(R^* e^{2ikx} - Re^{-ikx})\right]\right\} = \frac{\hbar}{2im}\left[2ik(1 - R) = \frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2)\right)$$

بإمكاننا أن ننظر لــ e^{ikx} بفيض قدرة $\frac{\hbar k}{m}$ كموجة ساقطة. ولو لــم يكــن هناك جهد بإمكاننا أن نختار e^{ikx} كحل لكل قيم x وعليه نعزي R لوجود الجهد هذا الجهد ينشئ الموجة المنعكسة Re^{-ikx} بفيض منعكس قدره $\frac{\hbar k}{m}|R|^2$ لقيم $x > 0$ بامكاننا أن نكتب الحل.

$$U(x) = T\,e^{ijx}$$

ولكن هذا الحد يصف موجة قادمة من $+\infty$ في اتجاه $\xleftarrow{-x}$ ولكــن فــي حالة موجة ساقطة من اليسار فإن الموجة الوحيدة على اليمين يمكن أن تكــون موجة نافذة transmitted were و الفيض المقابل لها.

$$j\;\frac{\hbar}{2im}\left[T^* e^{-iux}(Tiq\,e^{iqx}) - (-iq\,T^* e^{-iqx})\,T\,e^{iqx}\;\right]$$

وبما أنه لا يوجد اعتماد على الزمن في هذه المسألة فإن قانون الحفظ (البناء) $\frac{\partial}{\partial t}P(x,t)+\frac{\partial}{\partial t}j(x,t)=0$ يعني أن $j(x)$ لا تعتمد على x. وعليه فإن الفيض على الجانب الأيسر يجب أن يساوي الفيض على الجانب الأيمن.

$$\Rightarrow \frac{\hbar k}{m}(1-|R|^2) = \frac{\hbar i}{m}|T|^2$$

وإن اتصالية contiuwity الدالة الموجبة يؤدي $U(x)=U(x)$

$$e^{iux}+R\,e^{-iux}=T\,e^{2ikx}\Rightarrow \text{at } x=0\Rightarrow 1+R=T \qquad (a)$$

وكذلك فإن ميل الدالة الموجبة متصل عند $x = 0$ بالرغم من أن الجهد غير متصل وهذا يتضح بتكامل المعادلة $(\frac{d^2u(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)u(x)=0]$ من $-\in$ إلى $+\in$ حيث $\in$ رقم موجب فإن.

$$(\frac{du}{dx})_{\in}-(\frac{du}{dx})_{-\in}=\int_{-\in}^{\in}dx\frac{d}{dx}\frac{du}{dx}=\int_{-\in}^{\in}dx\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)u(x)=0$$

ملاحظة الجهد يحتوي على حد مثل: $V_{\circ}\,8(x-a)$ عندئذ فإن التكامل للمعادلة من $+a-\in$ إلى $a+\in$ يعطينا

$$(\frac{du}{dx})_{at\in}-(\frac{du}{dx})_{a-\in}=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\in}^{a+\in}V_{\circ}\,8(x-a)u(x)=\frac{2m}{\hbar^2}V_{\circ}\,u(a)$$

اتصال التفاضل للجهد في المسألة يعطي:

$$R=\frac{K-q}{K+q} \qquad , \qquad T=\frac{2k}{k+q}$$

ومن هذا يمكننا حساب الفيض المنعكس والنافذ flected and transmitted feuxes

$$\text{Refleted} \quad j=\frac{\hbar k}{m}|R|^2=\frac{\hbar k}{m}(\frac{k-q}{k+q})^2$$

$$\text{Transmitted} \quad j=\frac{\hbar q}{m}T^2=\frac{\hbar q}{m}(\frac{2k}{k+q})^2=\frac{\hbar k}{m}\frac{4\hbar q}{(k+q)^2} \qquad (C)$$

لاحظ الآتي:

١- بخلاف الميكانيكا التقليدية والتي طبقاً لها: جسم يسير فوق جهد فإنه سوف يتباطأ وذلك لحفظ الطاقة. ولكنه لا يمكن أن ينعكس. أما هذا فنلاحظ أن جزء معين من الجسيمات الساقطة انعكس. وهذا بالطبع نتيجة للطبيعة الموجية للجسيمات فإن الانعكاس الجزيء للضوء الساقط عند التماس بين وسطين فظاهرة معتادة.

٢- من خلال التعبيرات (معادلة C) نلاحظ أن قانون الحفظ (البقاء) متحقق أي أن الفيض على الجانب الأيسر = الفيض على الجانب الأيمن.

$$\frac{\hbar k}{m}\left(1-\left(\frac{k-q}{k+q}\right)^{2}\right)=\frac{\hbar q}{m}\,\frac{4k^{2}}{(k+q)^{2}}$$

$$\frac{\hbar k}{m}\,\frac{4qk}{(k+q)^{2}}=\frac{\hbar k}{m}\,\frac{4qk}{(k+q)^{2}}$$

٣- في حالة $E \gg V_o \Leftarrow k=\frac{2m}{\hbar^2}E \approx \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_o)=q$ فإن النسبة بين الفيض المنعكس والساقط $|R|^2 \to o$

$$\frac{JR}{JT}=\frac{(k-q)^{2}}{4kq}\to 0$$

وهذه النتيجة تتفق مع الحدس والذي يدل على أنه عند الطاقات الحالية فإن وجود عقبة الجهد ما هو إلا تشويه قليل على انتشار الموجه.

٤- لو أن $E < V_o$ في هذه الحالة $q=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_o)}$ تصبح كمية تخيلية في هذه الحالة فإن الحلول $x > 0$ يكون لها.

$$U(x)=T\,e^{i(iq)x}=T\,e^{-|q|x}$$

في هذه الحالة:

$$|R|^{2}=R\,R^{*}=\left(\frac{k-i|q|}{k+i|q|}\right)\left(\frac{k-i|q|}{k+i|q|}\right)^{*}=\frac{k-i|q|}{k+iq}\,\frac{k+i|q|}{k-i|q|}=1$$

وفي هذه الحالة توجد موجة منتشرة عن يمين الجهد لأن $u = Te^{-|q|x}$ ليست موجة راحلة. وهكذا، كما في الميكانيكا التقليدية يكون انعكاس كلي. لاحظ (من ناحية أخرى) أن.

$$T = \frac{2k}{k + i|q|} \neq 0$$

وهذا يعني أن جزء من الموجة يخترق Penetrates إلى داخل المنطقة الممنوعة (المحرمة) وظاهرة الاختراق هذه من ظواهر الموجات وسنرى بعد قليل أن هذه ستسمح بـ "tunneling" الاختراق من خلال الجهد. والذي من ناحية الفيزياء التقليدية سيمنع بالكامل الجسيمات ويمنعها من الافتراق. وفي الحقيقة فإنه لا يوجد فيض من الجسيمات لليمين وذلك لأن $j\ (x)$ تختفي للحلول الحقيقية حتى لو المعامل للأمام أخذ كمية مركبة ظاهرة الانعكاس الكلي رياضياً تكافئ للذي يحدث للضوء عندما يسقط على سطح (تماس) بين وسطية لهما معامل انكسار مختلف $(n_2 > n_1)$ بزاوية أكبر من الزاوية الحرجة. فإن الضوء يعاني من انعكاس كلي ولكن سيكون هناك اضمحلال للمجال الكهرومغناطيسي الذي يخترق المنطقة المحرمة.

بئر الجهد The Potential well:

نأخذ الجهد الموضع بـ

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & x &< -a \\ &= -V_o & -a &< x < a \\ &= o & a &< x \end{aligned}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad q^2 = \frac{2m(E + V_o)}{\hbar^2}$$

الحلول:

$$
\begin{aligned}
x &< -a \quad \Rightarrow \quad u(x) = e^{ikx} + R\,e^{-ikx} \\
-a < x &< a \quad \Rightarrow \quad u(x) = A\,e^{iqx} + B\,e^{-iqx} \\
x &< a \quad \Rightarrow \quad u(x) = T\,e^{ikx}
\end{aligned}
$$

وهذه تطابق لفيض قادم (ساقط) $\frac{\hbar k}{m}$ من اليسار وفـيض مـنعكس مـن اليمين $\frac{\hbar k}{m}|R|^2$ وفيض نافذ $\frac{\hbar k}{m}|T|^2$.

أما داخل البئر فإنه توجد موجات ذاهبة في كلا الاتجـاهين وذلـك لأن الانعكاس يحدث من الطرفين عند $x=\pm$ وطبقاً لقانون حفظ الفيض.

$$
\frac{\hbar k}{m}\,(1-|R|^2) = \frac{\hbar q}{m}\,(|A|^2 - |B|^2) = \frac{\hbar k}{m}\,|T|^2
$$

وبتطابق الدوال الموجية وتفاضلاتها يعطينا أربع معادلات.

$$
\begin{aligned}
& e^{-ika} + R\,e^{+ika} = A\,e^{-iqa} + B\,e^{iqa} \\
& ik\,(e^{-ika} - R\,e^{ika}) = iq\,(A\,e^{-iqa} - B\,e^{iqa}) \\
& A\,e^{+iqa} + B\,e^{-iqa} \;\; T\,e^{ika} \\
& iq\,(A e^{iqa} - B\,e^{-iqa} = ik\,T\,e^{ika}
\end{aligned}
$$

وبحل هذه المعادلات

$$
R = i e^{-2ika}\,\frac{(q^2-k^2)\sin 2qa}{2kq\cos 2qa - i\,(q^2+k^2)\sin 2qa}
$$

$$
T = e^{-2ika}\,\frac{2kq}{2kq\cos 2qa - i\,(q^2+k^2)\sin 2qa}
$$

وفي حالة $E>>V_o$ فإنه لا يوجد عملياً انعكــاس وذلــك لأن $q^2-k^2 << 2kq$ وكذلك عندما $E\rightarrow o$ فإن النفاذية $\leftarrow o$

في حالة $\sin 2\,ga = 0$ في حالة الطاقات موجبة المعطاة بـــ

لهذه القيم من الطاقة لا يوجد انعكاس $R = 0$. وهذا نموذج لما يحدث في استطارة الكترونات ذات طاقة منخفضة (0.1 eV) بواســطة غــازات فاعلــة (نيون، أرجون) والذي يوجد بها نفاذية عالية غير طبيعية. هذه الظــاهرة تــم

مشاهدتها أولاً بواسطة Ramsauer , Townsend ووصفت بأنه رنين النفاذيــة transmission resonance.

ولتقديم مناقشة دقيقة فإنه من الضروري إدخال (وضع فـــي الحـــسبان) اعتبارات ثلاثة وبلغة الموجات، فإن التأثير بسبب التداخل الهدام بين الموجــات المنعكسة عند c = - a والموجات المنعكسة مرة واثنين وثلاثــة عنــد x = 0 وشرط الرنين. $\lambda = \frac{2D}{q} = \frac{2D}{nD} = \frac{4a}{n} \Leftarrow 2qa = n\hbar$ وهذا هو الــذي يــصف Fairy – Perotintenforometeer. وهذا هو شرط عمل جهاز.

الحلول في E < 0 بشرط أن V_o سالبة (أي أن V_o في المعادلة $V(x)=o$

$$= V_o \to > o$$
$$= o$$

ستكون (كما سنرى الحلول مجزأة discrete). خذ

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = -K^2$$

الحلول خارج البئر والتي تكون مقيدة عند ∞

$$
\begin{aligned}
u(x) &= C_1\, e^{kx} && x < -a \\
u(x) &= C_2\, e^{-kx} && a < x \\
u(x) &= e^{+ikx} + Re^{-ikx} && x < -a \\
u(x) &= A e^{iqx} + Be^{-iqx} && -a < x \\
u(x) &= T e^{iux} && a < x
\end{aligned}
$$

وبما أننا نتعامل مع دوال حقيقية فإنه في هذه الحالة من المناسب أن نكتب الحلول داخل البئر بالشكل.

$$u(x) = A\cos qx + B\sin qx \qquad -a<x<a$$

لاحــظ أن $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_o - |E|) > o$ وذلــك لأن $V_o > E$ بتطــابق الحلــول وتفاضلاتها عند الجواب $x = \pm a$ يعطينا

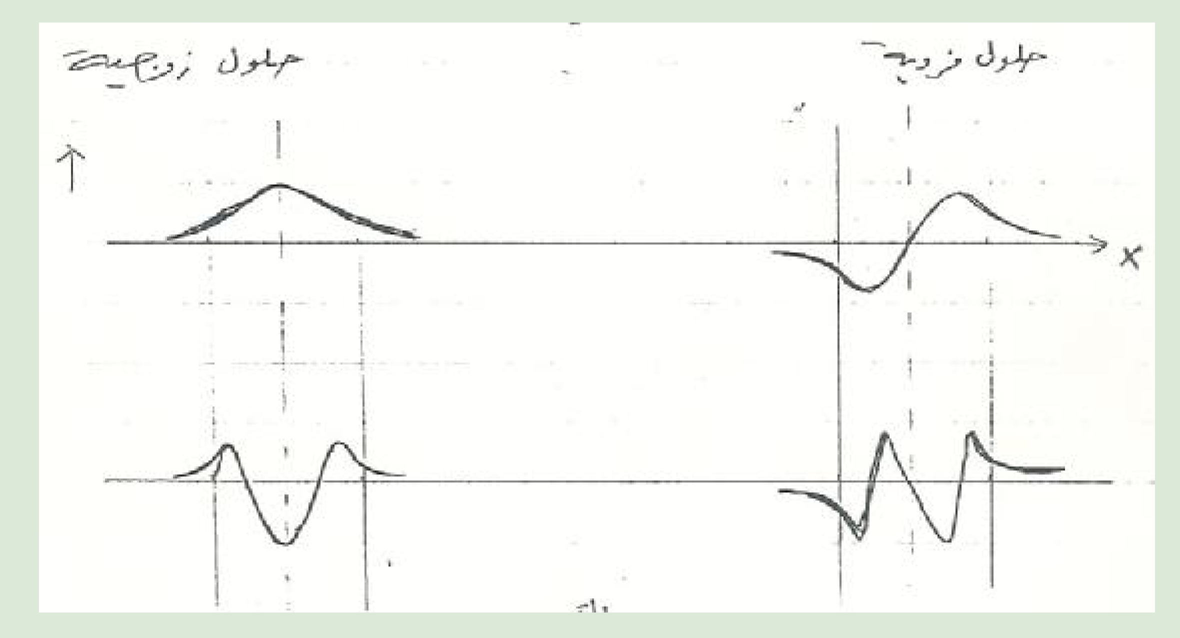
$$C_1\ e^{-ka} = A\cos qa - B\sin qa$$
$$uC_1\ e^{-ka} = [A(\sin qa)q] + B(\cos qa) = q(A\sin qa + B\cos qa)$$
$$C_2\ e^{-ka} = A\cos qa + B\sin qa$$
$$-kC_2\ e^{-ka} = q(A\sin qa - B\cos qa)$$

من هذه المعادلات يمكننا كتابة K.

$$k = q\frac{A\sin qa - B\cos qa}{A\sin qa + B\cos qa} \qquad (1)$$
$$= q\frac{A\sin qa + B\cos qa}{A\sin qa - B\cos qa} \qquad (2)$$

وهاتين المعادلتين معاً تعني أن $AB = 0$ وهذا يعني أن الحلول إما زوجية = x (B = 0) أو فردية = x (A = 0)

والدوال تقريباً شكلها الموضح في الشكل.



والحالة الدنيا groudstate (التي ليس لها عقد) تكون زوجية والشروط التي تحدد الطاقة.

من المعادلة (1)

حلول زوجية (B = 0) $K = q\,\tan qa$

من المعادلة (2)

حلول زوجية (A = 0) $K = q\tan qa$

دعنا نختبر هذه الحلول منفصلة.

(a) الحلول الزوجية:

استخدم الرمز $\lambda = \frac{2mV_o a^2}{h^2}$ (تتناسب مع عمق البئر)

$y = qa$ (تتناسب مع عرض البئر)

إن نقاط التقاطع تحدد القيم الخاصة . وهذه تتمثل فئة متقطعة discete ser

وكلما كبرت قيمة l فإن المنحنيات للمعادلة $\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}$ تمضي.

أي: عندما يزداد عمق الجهد أو يستعرض فإنه يوجد المزيد من الحالات المربوطة (المقيدة) lundstates والشكل يبين كذلك أنه لا يهم كم تكون قيمة l صغيرة فإنه سيكون دائماً على الأقل حالة مربوطة واحدة. وهذا أمر يميز الجهد الجاذب ttractiuepot في بعد واحد وليس صحيحاً في ثلاثة أبعاد والذي يسلك سلوك الحلول الفردية (ستنافس فيما بعد). وكلما كبرت l فإن القيم الخاصة تؤول وتصبح متساوية المسافة في l وبنقاط التقاطع المعطاة بالمعادلة.

$qa = y = (n + \frac{1}{2})D \quad , \quad n = 0, 1, 2, ...$ وهذا هو شرط القيم الخاصة للحلول الزوجية لصندوق ما لا نهاية متمركز حول النقطة الأصل.

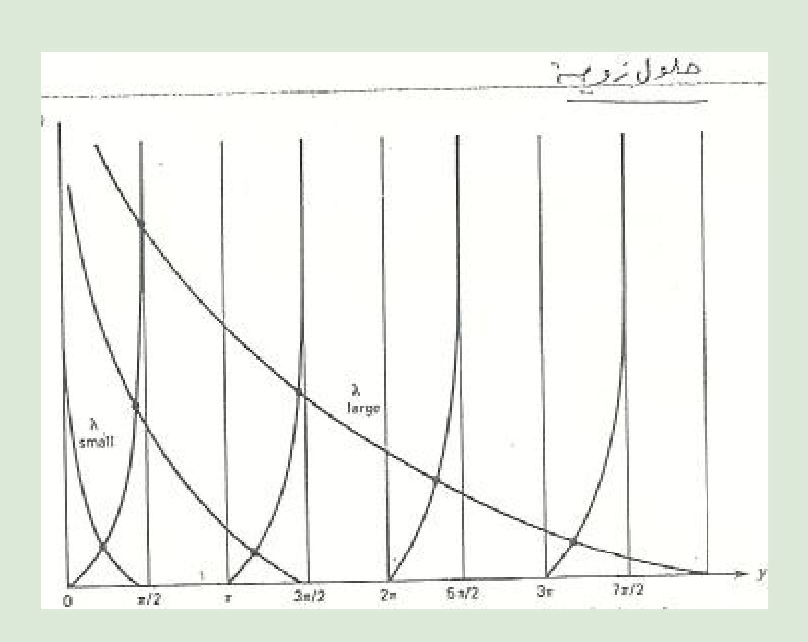


Figure 5-11. Location of discrete eigenvalues for even solutions in square well. The rising curves represent tan y; the falling curves are $\sqrt{l-y^2/y}$ for different values of l

(b) الحلول الفردية: هنا سيكون شرط القيمة الخاصة.

$$\sqrt{\frac{\lambda-y^2}{y}}=-\cos y$$

وبما أن $-\text{cory}=(\frac{\mathbf{D}}{2}+y)$ فإن الرسمة التالية تبدو مثل الرسمة أعلاه ولكـــن منحنيات tan متزحزحة بمقدار $\frac{\mathbf{D}}{2}$ وكلما كبرت l فإنها تسلك بنفس الطريقـــة ولكن معادلة $y=(n+\frac{1}{2})$ ستستبدل بـــ $y=n\mathbf{D} \quad , \quad n=1,2,3,\ldots\ldots$

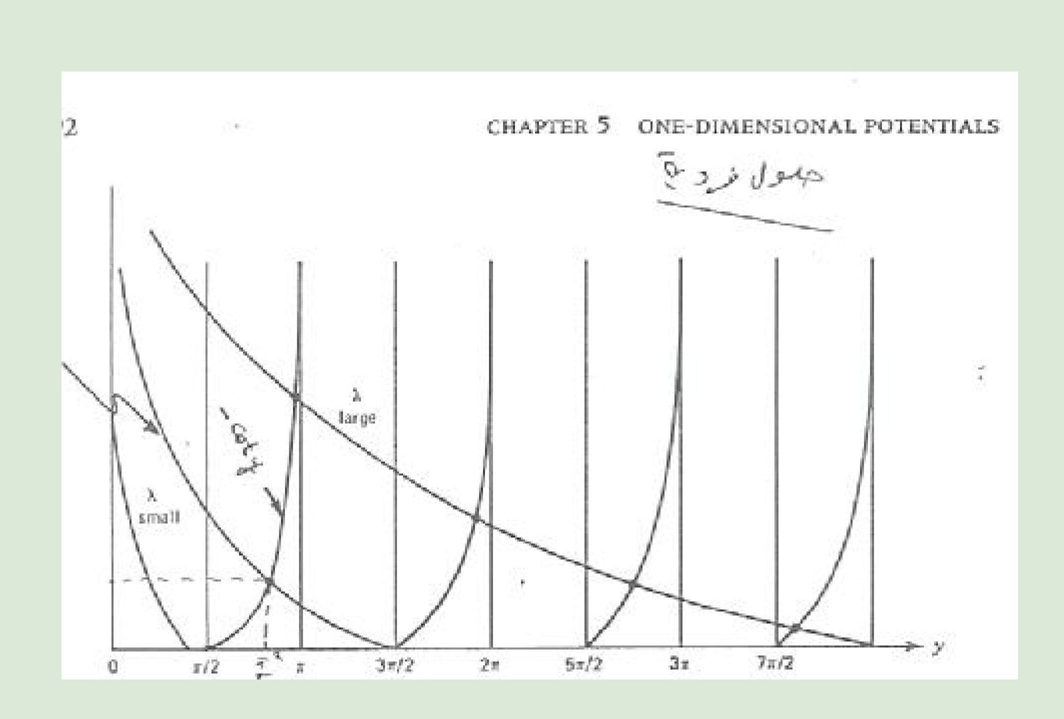
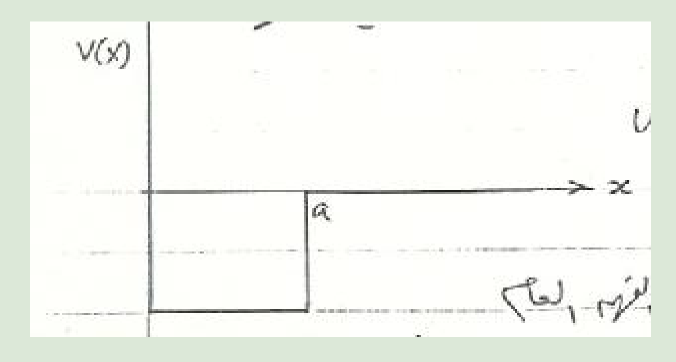


Figure 5-12. Location of discrete eigenvalues for odd solutions in square well. The rising curves represent – cot y; the falling curves are $\sqrt{l - y^2/y}$ for different values of l Note that thee is no eigenvalue for $l < (p/2)^2$

وعلى عكس الحلول الزوجية فإنه سيكون تقاطع لــون أن. $\sqrt{\lambda - \frac{D^2}{4}} > o$

انظر إلى الشكل أعلاه، ولاحظ أن تقاطع يحدث عندما $\lambda > \frac{D^2}{4} = 2.40$

من الشكل نلاحظ أن الحلول الفردية تختفي (تتلاشى) عند x = 0 وعليــه فإن مسألة الحالات المقيدة للحلول الفردية ستكون هي نفسها عندما يكون لها بئر الجهد هو الموضح في الشكل التالي.



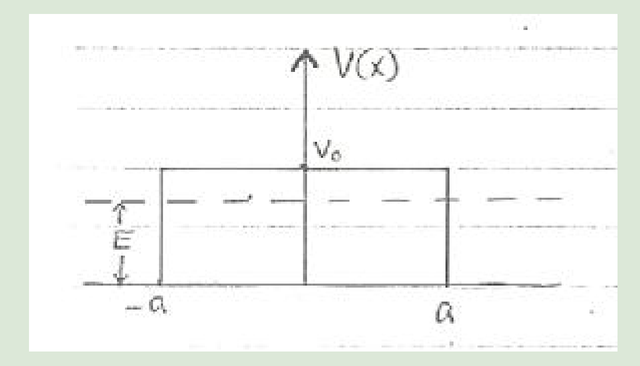
وذلك لأن الشرط (عند هذا الجهد) $U(o)=0$ سيكون صحيح.

ومن الحسابات التفصيلية فإنه يمكننا تأكيد الفهم العام للسبب في الحصول على قيم خاصة (غير متصلة). هذه القيم تظهر وذلك لأن الدالة الموجبة يجب أن تتلاشى عند ∞.

حاجز الجهد (الاختراق النفقي) The Potential Barrier

خذ الجهد كالتالي:

$$
\begin{aligned}
V(x) &= 0 && x < -a \\
&= -V_o && -a < x < a \\
&= o && a < x
\end{aligned}
$$



ولعنا نحصر المناقشة للطاقات بحيث $E < V_o$ أي أنها الطاقات التي لا تسمح باختراق الحاجز طبقاً للميكانيكا التقليدية.

داخل الحاجز (الحلول) للمعادلة.

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_o)}\,u(x)=0$$

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - K^2\,u(x)=0$$

$$K^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_o - E)$$

الحل العام.

$$U(x) = A\,e^{-kx} + B e^{kx} \qquad |x| < a$$

أي أنه توجد نفاذية بالرغم من أن الطاقة أقل من قمـــة الحـــاجز $(E<V_o)$ وهذه ظاهرة موجية وفي ميكانيكا الكم نفس الظاهرة تلاحظ من الجسيمات هذه هي ظاهرة الاختراق النفقي لجسيم خلال حاجز عادة ما تلاحظه.

إن دالة الموجة لا تتلاشى داخل الحاجز كما يعني احتمال وجود الجـــسم بطاقة سالبة. ولكن كيف يمكن أن لهذا معنى؟

لو نظرنا لمبدأ اللاتعيين لتسعفنا من التناقض مع الميكانيكا التقليدية.

إن تجربة دراسة الجسم داخل حاجز الجهد يجب أن تحيزه بدقة قدرها

$$\Delta x << 2a$$

وهذه التجربة (القياسات) ستنقل لكمية الحركـــة للجـــسيم بعـــدم تحديـــد تكررها. $\Delta p >> \frac{h}{2a}$ وهذا يقابله انتقال للطاقة قـــدره $\Delta E >> \frac{h^2}{8ma}$ ولمـــشاهدة طاقة حركة سالبة، فإن هذا اللاتعيين يجب أن يكون أقل بكثيـــر مـــن $|E-V_o|$ بحيث أن $\frac{h^2}{8ma^2} << E << \frac{h^2k^2}{2m}$

وبشكل عام فإن الحواجز التي تحدث في الظواهر الفيزيائية الحقيقيـــة لا تكون مربعة، ولمناقشة بعض التطبيقات يجب أولاً أن نستنتج تعبيرات تقريبيـــة لمعامل النفاذية $|T|^2$ خلال حواجز جهد غير منتظمة والطريقة لعمل هذا مـــع اعتبار أنه لا توجد حلول دقيقة لمعظم أشكال الجهد هو عـــن طريقـــة تقريـــب Wentzel- kreners – Birllouin (WKB) بملاحظة المعادلة

$$|T|^2 \approx \left(\frac{4ku}{K^2+u^2}\right)^2 e^{-4ka}$$

والتي تتكون من حدين، فإن الحد الثاني هو المهيمن والغالـــب. وبكتابـــة المعادلة مع الشكل itsholdbe4.

$$\ln |T|^2 = 2u(2a) + 2\ln \frac{2(ka)(ua)}{(ka)^2 + (ua)^2}$$

تحت كل الحيثيات فإن الحد الأول هو الغالب (المهيمن) على الحد الثاني لأي قيمة Ka والطريقة التي سنتبعها هي معالجة حاجز منحنى كحواجز مربعة متجاورة uxtaposition وبما أن معاملات النفاذية مضروبة عندما تكون صغيرة وعندما يكون معظم الفيض منعكس، فإن النفاذية ضرب كـل شـريحة تكـون مستقلة فإن هذا قليل الاحتمال.

$$\begin{aligned} \ln |T|^2 &\simeq \sum \ln |T|^2 \\ &\simeq -2\sum \Delta x < k > \\ &\simeq -2 \int_{barier} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]} \end{aligned}$$

حيث Δx هو العرض $\langle u \rangle$ هو متوسط قيمة k لذلك الحاجز.

لاحظ أن هذا التعبير فيه تقريب كبير لسببين خاصة عند نقطة الانعطاف حيث الطاقة والجهد يتساويان. ومن المهم أن يكون $V(x)$ هي دالة متغيرة ببطئ في x وإلا فإن تقريب الجهد المنحنى مربعات متراصة يكون ممكناً لو كانـت هذه المربعات ضيقة جداً وعندها كذلك المعادلة $|T|^2 \simeq \left(\frac{4ku}{\;}\right)$ هو تقريب غير جيد. ولكن من المناسب كتابة.

$|T|^2 \simeq e^{-2\int dx \sqrt{(2m/\hbar^2)^2 (V(x) - E)}}$ حيث أن التكامل يكون على المنطقة التي فيها يكـون الجذر التربيعي حقيقي.

التأثير النفقي Tunneling Phenomena

تعتبر هذه الظاهرة شائعة في الفيزياء الذرية والنووية وسـوف نناقش أمثلة.

الانبعاث (الالكتروني) البارد Cold Emission.

خذ الكترونات في معدن. إن هذه الالكترونات مقيدة داخل المعدن بواسطة جهد والذي كتقريب أولي، يمكن وصفه بصندوق ذو عمق محدد كما هو موضح بالشكل.



لاحظ أن مستويات الطاقة للالكترونات قريبة جداً من بعضها وذلـــك لأن الصندوق عريض جداً.

من خواص الإلكترونات (والتي توصف بمبدأ بالولي) أنها تترتــب فـــي مستويات الطاقة بحيث أنه لا يوجد أكثر من الكترونين يمكن أن يشغلها مستوى واحد من مستويات الطاقة. وهكذا فأقل حالة للطاقة في المعدن، كل المستويات إلى حد مستوى طاقة يسمى مستوى طاقة فيرسي (والتي تعتمـــد علـــى كثافـــة الإلكترونات) تكون معبأة. وعند درجة حرارة أعلى من الصفر المطلـــق فـــإن بعض هذه الالكترونات تكون حرارية مهيجة لمستويات. الفرق بـــين مـــستوى طاقة هو الذي يلزم لاحضار الكترون للخارج، دالة الشغل. الإلكترونات يمكـــن إزالتها بإعطائها بالفوتونات (كما في التأثير الكهروضوئي) وإما بالحرارة. كذلك يمكننا إزالتها بالتأثير عليها بمجال كهربائي خارجي. إن الانبعاث الإلكترونـــي البارد يحدث نتيجة تأثير مجال كهربائي خارجي والذي بدوره يغير الجهد الذي يرى بالكترونات أي يتغير الجهد $\omega - e\varepsilon x \leftarrow W$ في هذه الحالة فإن هذا هو الجهد الذي تراه الإلكترونات وهذا يكـــافئ الفـــرق $\{V(x)-E\}$ (الـــشكل b) فلـــو أن الالكترون عند القمة للبحر من المستويات في هذه الحالة فإن معامل النفاذية.

$$|T|^2 \simeq e^{-2\int_0^a dx\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(|V-e\varepsilon x|)}}$$

$$\int dx\,(A+Bx)^{1/2} = \frac{(A+Bx)^{3/2}}{\frac{3}{2}B}$$

$$\int_o^{W/e\varepsilon} dx\left[\frac{2m}{\hbar^2}(w-e\varepsilon\varepsilon x\right]^{1/2} = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2}\frac{(\omega-e\varepsilon\varepsilon x^{3/2}}{-\frac{3}{2}e\varepsilon}\Big]_o^{w/e\varepsilon}$$

$$= \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{2w^{3/2}}{3e\varepsilon}$$

$$\Rightarrow |T|^2 = e^{-2} = e^{-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2mw}{\hbar^2}}\left(\frac{w}{e\varepsilon}\right)}$$

وهذا هو قانون Fowler – Nordheim

ومن تطبيقات الانبعاث البارد هو Scanning Tunneling Micros cepe STM وهذه الأداة تعتمد على الحساسية العالية جداً للمسافة في الانبعاث البارد. إن تيار الإلكترونات المحث بجهد كهربائي خارجي للفرق في الجهد سطح المعدن ونهاية إبرة حادة فوق سطح يتغير أسياً بالمسافة بين الإبرة والسطح وهذا يسمح بالحصول على معلومات منفصلة عن توبوجرافية السطح

وهذا قد تم استخدام STM لدراسة أسطح المعادن وبعض الموصلات وقد تم حديثاً نقل ذرات وجزيئات على الأسطح وذلك بتخزينها.

التأثير النفقي في المواد فائقة التوصيل Tunneling in superconductors.

المتذبذب التوافقي البسيط The Harmonic Oscillator

في هذا المثال سنجد أن المعادلة التفاضلية المطلوب حلها تختلف عن الأمثلة السابقة و أحد أسباب مناقشة هذه المسألة هو تعلم حل مثل هذه المسائل.

الهاملتونيان التقليدي له الشكل.

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kx^2 \qquad (1)$$
$$=k.E \;\; = p.E$$

وعليه فإن معادلة القيمة الخاصة.

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}k\,x\,\hbar^2\,(x)\,E.u \qquad (2)$$

(3) بتعريف تردد المتذبذب وكتابة الطاقة على الشكل $k=m\omega^2 \Leftarrow \omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$

$$\in=\frac{2E}{\hbar\omega} \qquad (4)$$

(5) وتغيير المتغيرات $y=\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\;x$

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2}-\frac{m^2w^2}{\hbar^2}x^2u+\frac{2mE}{\hbar^2}u=0$$

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2}-\frac{mw}{\hbar}\left(\underbrace{\frac{mw}{\hbar}x^2}_{y^2}-\underbrace{\frac{2E}{\hbar\omega}}_{\in}\right)u=0$$

$$\frac{1}{\frac{mw}{\hbar}}\frac{d^2u}{dx^2}+(\in-y^2)u=0\Rightarrow\frac{d^2u}{dy^2}+(\in-y^2)u=0 \qquad (6)$$

كل الكميات هنا بدون وحدات.

حلول هذه المعادلة هي الدوال الذائبة.

$$u_n=\frac{e^{-y^{3}/2}}{\sqrt{2^n\,n\sqrt{D}}}H_n(y)$$

حيث $H_n(y)$ تعرف بكثيرات محدودة.

$$H_0(y) = 1$$
$$H_1(y) = 2y$$
$$H_2(y) = 4y^2 - 2$$
$$H_3(y) = 8y^2$$

النظر للحلول عند ما لا نهاية (أولاً) ثم عند الصفر.

ولأي قيمة خاصة (ذاتية) E. eijenvalne، عندما $y^2 \to \infty$ فإن الحد الـــذي يتضمن E يعبر مهمول. ولهذا السبب يتطلب أن u (y) asymptotically تحقــق المعادلة.

$$\frac{d^2 u_o(y)}{dy^2} - y^2 u_o(y) = 0 \qquad (7)$$

بالضرب في $2\frac{du_o}{dy}$ يمكننا من كتابة المعادلة بالشكل.

$$\frac{d}{dy}\left(\frac{du_o}{dy}\right)^2 - y^2 \frac{d}{dy}(u_0{}^2) = 0 \qquad (8)$$

أو ما يكافؤها.

$$\frac{d}{dy}\left[\left(\frac{du_o}{dy}\right)^2 - y^2 u_0{}^2\right] = -2\, y^2 u_0{}^2 \qquad (9)$$

ولو أهملنا الحد على الجانب الأيمن من المعادلة فإنه سيسر الحل وبتكامل المعادلة.

$$\frac{d}{dy}\left[\left(\frac{du_o}{dy}\right)^2 - y^2 u_0{}^2\right] = 0 \Rightarrow \left(\frac{du_o}{dy}\right)^2 - y^2 u_0{}^2 = C$$

$$\frac{du_o}{dy} = (C + y^2 uo^2)^{1/2}$$

بما أن كلاً من $\frac{du_o}{dy}, u_o(y)$ يجب أن تتلاشى عن ∞، فإن هذا يحـــتم أن C = 0 وهكذا.

$$\frac{du_o}{dy} = \pm y u_o \qquad \int \frac{du_o}{u_o} = \pm \int y\,dy \qquad (10)$$

الحلول المتبدلة عند ∞، هي.

$$U_o(y) = e^{-y^2/2}$$

بإمكاننا الآن اختبار أن $2yU_o^2 = 2ye^{-y^2}$ كمية مهملة مقارنة بـــ

$$\frac{d}{dy}(y^2 U_o^2) = \frac{d}{dy}(y^2 e^{-y^2}) \simeq -4y^3 e^{-y^2}$$

وذلك باعتبار y قيمة كبيرة.

الآن سنستحدث دالة جديدة $h(y)$ بحيث أن

$$U(y) = h(y)\, e^{-y^2/2} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots(12)$$

وعليه فإن المعادلة التفاضلية تصبح.

$$\frac{d^2h(y)}{dy^2} - 2y\frac{dh(y)}{dy} + (\in -1)\, h(y) = 0 \qquad \ldots\ldots\ldots(13)$$

وشكل المعادلة لا يبدو بسيطاً، ولكننا ناقشنا السلوك عند مـــا لا نهايـــة، والآن نريد أن ننظر للسلوك عند $y = 0$. دعنا نحاول كتابة الحل علـــى شـــكل مفكوك سلسلة القوة. Power series expansion.

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots(14)$$

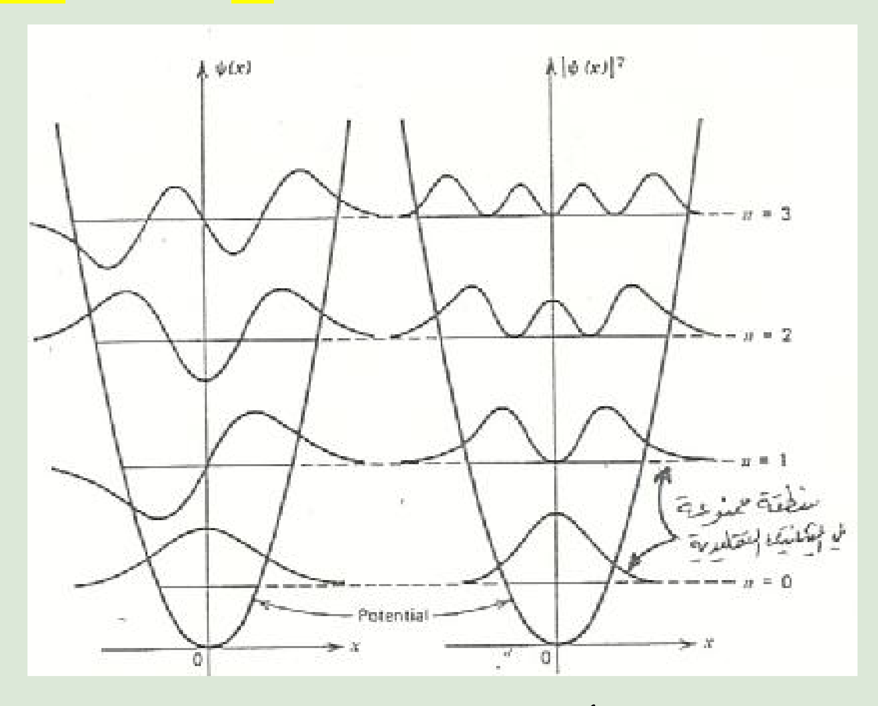
$$\sum_{m=0}^{\infty} m(m-1)a_m y^{m-2} - \underbrace{2y\sum_{m=0}^{\infty} m\, a_m y^{m-1}}_{\sum_{m=0}^{\infty} m\, a_m y^m} + (\in -1)\sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m = 0$$

بأخذ معاملات y^m فقط.

$$(m+2)(m+1)a_{m+2} - 2(m+1)a_m + (\in -1)a_m = 0$$

$$(m+2)(m+1)a_{m+2} = (2m - \in + 1)a_m \qquad \ldots\ldots\ldots(15)$$

وهذه هي المعادلة الاستطراد للحصول على a_m إذا عرفنا a_1 , a_0.



ولقيم اختيارية ∈، نجد أن عندما تكون m كبيرة $(m>N)$

$$a_m+2 \simeq \frac{2}{m} \quad a_m$$

وهذا يعني أن الحلول تقريباً (باختيار الحلول الزوجية). وهذا

$$h(y)=(atolyromialiny)$$

$$+a_N\left[y^N+\frac{2}{N}y^{N+2}+\frac{2^2}{N(N+2)}y^{N+4}+\frac{2^3}{N(N+2)\ (N+4)}y^{N+6}+..........\right]$$

وبالتبسيط

$$a_N\, y^2\,(\frac{N}{2}-1)!\left[\frac{(y^2)^{\frac{N}{2}-1}}{(\frac{N}{2}-1)!}+\frac{(y^2)^{N/2}}{(\frac{N}{2})!}+\frac{(y^2)^{\frac{N}{2}+1}}{(\frac{N}{2}+1)!}+..........\right]$$

باختيار $N=2k$ (للملائمة) فإن المتسلسلة تأخذ الشكل.

$$y^2\,(k-1)!\left[\frac{(y^2)^{k-1}}{(k-1)!}+\frac{(y^2)^k}{k!}+\frac{(y^2)^{k+1}}{(k+1)!}+..........\right]$$

$$= y^2(k-1)!\left[e^{y^2} - \{1+y^2+\frac{(y^2)^2}{2!}+\ldots\ldots\ldots+\frac{(y^2)^{k-1}}{(k-2)!}\right]$$

وهذا شكل متعدد الحدود + ثابت x $y^2 e^y$

وبالتعويض هذه المعادلة في المعادلة $4(y)=h(y)e^{-y^2/2}$

فإننا سنتحصل على حل لا يتلاشى عند ∞ والحل المقبول يمكن أن يوجد لو أن معادلة الاستطراد تنتهي، أي أن لو أن.

$$(N+1)(N+2)a_{n+2} = \underbrace{2N-\in+1}_{=0}\, a_n = 0$$

$$\Rightarrow \in = 2N+1 \qquad (17)$$

$$\frac{2E}{\hbar w} = 2N+1$$

والنتائج هي:

1- أنه يوجد قيم ذاتية منفصلة (غير متصلة) متساوية المسافات من المعادلة (4) والمعادلة (17) يمكننا الحصول على المعادلة التالية.

$$E = \frac{1}{2}\hbar w\,(2m+1) = (n+\frac{1}{2})\hbar w \qquad (18)$$

وهذه قريبة من معادلة Planck للإشعاع.

$$E = (n+\frac{1}{2})\hbar w$$

2- ما عدا ثوابت المعايرة، فإن متعدد الحدود هو متعدد الحدود الهيرميتي $H_n(y)$ والذي يمكن إيجاد خواصه بسهولة في أي كتاب في الفيزياء الرياضية.

ولو قصرنا أنفسنا للخواص التالية منها:

$H_n(y)$ تحقق المعادلة التفاضلية.

تحت شرط $\in = 2_n + 1$

$$\frac{d^2H_n(y)}{dy^2} - 2y\frac{dH_n(y)}{dy} + 2nH_n(y) = 0$$

وهذه تحقق العلاقات الاستطرادية التالية ecussionedations

$$H_{n+1} - 2yH_n + 2nH_{n-1} = 0$$

$$H_{n+1} + \frac{dH_n}{dy} - 2yH_n + 2nH_n = 0$$

وكذلك

$$\sum_n H_n(y)\frac{z^n}{n!} = e^{2zy-z^2}$$

و

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$$

والتطبيع لكثيرات حدود هيرميت يكون بحيث

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-y^2} H_n(y)^2 = d^n\, n!\sqrt{D}$$

هذه قائمة ببعض عديدات حدود هيرميت.

$$H_0(y) = 1$$
$$H_1(y) = 2y$$
$$H_2(y) = 4y^2 - 2$$
$$H_3(y) = 8y^2 - 12y$$
$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12$$
$$H_5(y) = 32y^5 - 160y^3 + 129y$$

ومعادلات القيم الذاتية (الخاصة)

$$\frac{d^2u_n}{dx^2} = \frac{mk}{\hbar^2}x^2u_n - \frac{2mEn}{\hbar^2}u_n$$

و

$$\frac{d^2u^*_e}{dx^2} = \frac{mk}{\hbar^2}x^2u^*_e - \frac{2mEn}{\hbar^2}u^*_e$$

وعند ضرب u^*_e و u_n بالمعادلتين السابقتين على التوالي، المعادلة الثانية تطرح من الأولى.

$$\frac{d}{dx}\left(u^*_x\frac{dun}{dx} - \frac{du^*_x}{dx}u_x\right) = \frac{2m}{\hbar^2}(E_x - E_n)u^*_x u_n$$

وبتكامل هذه المعادلة على x من $-\infty \leftarrow +\infty$ فإن الجانب الأيسر يتلاشى، بما أن المعادلات الخاصة وتفاضلاتها تتلاشى عند $x=\pm\infty$ وهكذا.

$$(E_x - E_n)\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_e^*(x)\, u_n(x)=0$$

والذي يعني أن الدوال الخاصة التي لها $E_e \pm E_n$ هي متعامدة.

3- المعادلة $E=\hbar w(n+\frac{1}{2})$ توضح أن أقل حالة لها طاقة وهذه هي طاقة نقطة الصفر Zero – point evergy.

إن وجودها هو تأثير كمي بحت، ويمكن تأويله بدلالة مبدأ اللاتعيين. إنها طاقة نقطة الصفر المسئولة عن الحقيقة أن الهيليوم لا يتجمد عند درجات الحرارة القليلة، ولكنه يبقى في الحالة السائلة حتى درجات حرارة مقدارها 10^{-3}k وذلك عند الضغط العادي. التردد لها يكون كبيراً للذرات الخفيفة. والذي هو السبب في أن النيتروجين لا يظهر هذا التأثير مثل الهيليوم. إنه كذلك يعتمد على الخواص التفضيلية للقوى الفاعلة بين الجزيئات والتي تشرح السبب في أن الهيدروجين يتجمد.

البناء العام لميكانيكا الكم (الميكانيكا الموجية):

سنتعرض في هذا الفصل لدراسة المبادئ الأساسية التي ذكرت آنفاً في سياق حل بعض المسائل الفيزيائية من هذه نظرية المفكوك ومعناها الفيزيائي في المؤثرات متجهات الحالة، التكرار والنهاية التقليدية. وسنقدم ترميز ديراك باختصار.

الدوال الخاصة والقيم الخاصة:

"مؤثر الهاملتونيان"

إن حالة أي نظام فيزيائي يوصف بالدالة الموجية والتي تحتوي على كل المعلومات عن هذا النظام. إن الدالة الموجية تعتمد على الزمن، وتطورها مع الزمن يعطي بـ:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t) \qquad (1)$$

إن الدالة الموجية آثرنا عليا بمؤثر H، الهاملتونيان والذي يلعب دوراً كبيراً في ميكانيكا الكم. المؤثر H لنظام من جسم واحد في جهد V له الشكل.

$$H = \frac{p_{sp}^2}{2m} + V(x)$$

وإذا كانت V (x) ليس لها اعتماد واضح على الزمن فإن المعادلة (١) يمكن حلها بـ:

$$\psi(x,t) = u_E(x)\, e^{-Et/\hbar}$$

حيث:

$$H u_E(x) = E u_E(x)$$

إن حلول هذه المعادلة $u_E(x)$ هي الدوال الخاصة للهاملتونيان و E هـــي القـــيم الخاصة وفي هذا الفصل سنذكر على خاصيتين مهمتين للدوال الخاصة لـــ H.

1- الدوال الخاصة المطابقة لقيم خاصة مختلفة (أي قيم مختلفة لـــ E) تكـــون هذه الدوال متعامدة أي:

$$\int dx\, u_E^*(x)\, u_{E'}(x) = 0 \qquad E \neq E'$$

2- إن الدوال الخاصة تكون فئة الهاملة – أي أن – دالة اختيارية $\psi(x)$ تكـــون مربعة التكامل لكي.

$$\int dx\, \psi^*(x)\, \psi(x) \quad < \quad \infty \qquad (6)$$

يمكن أن تمد (أو تفك) expanded بدلالة القيم الخاصة للهاملتونيان.

$$\psi(x) = \sum_E C_E\, u_E(x) \qquad (7)$$

إن طيف H يمكن أن يكون منفصل (مجزأ) كما فـــي حالـــة المتذبـــذب التوافقي. ولو أن الجهد $V(x) \leftarrow 0$ عندما $x \leftarrow \infty$، فإن القيم الخاصة يمكـــن أن تكون منفصلة وكذلك متصلة.

وإن المعادلة (7) يمكن تعويضها بـــ:

$$\psi(x) = \sum_n C_n\, u_n(x) + \int dp\, C(p)\, u_p(x) \qquad (8)$$

إن الدوال الخاصة يمكن أن تضرب بثوابت بحيـــث أن تـــصبح معـــايرة وشروط المعايرة المتعامدة.

$$\int dx\, u_m^*(x)\, u_n(x) = d_{mn}$$

$$\int dx\, u_p^*(x)\, u_p(x) = \delta(1-2)$$

$$\int dx\, u_m^*(x)\, u_p(x) = 0$$

إن الدالة الموجية $\psi(x,t)$ يمكن تحديدها بملاحظة أن كل دالة خاصة لهـا اعتماد ستحصل على الزمن يعطي بـــ:

$$u_E(x,t) = u_E(x) e^{-iEt/\hbar}$$

$$\Rightarrow$$

$$\psi(x,t) = \sum_E C_E u_E(x) e^{-iEt/\hbar}$$

$$\psi(x,t) = \sum_E C_E u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \int dp\, C(p)\, u(x) e^{-ip^2 t/2m\hbar}$$

مشاهدات أخرى: O These Obseruobeas

إن الطاقة هي واحدة من المشاهدات لنظام مشاهدات أخرى كمية الحركة سنناقش كمية الحركة الزاوية (الفصل التالي).

معادلة: مؤثر كمية الحركة.

$$p_{op} u_p(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} u_p(x) = p\, u_p(x)$$

الدوال الخاصة تكــون اتــصال aconitum $(-\infty < p < \infty)$ والــدوال الخاصة تأخذ الشكل.

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2D\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

والدوال الخاصة تكون فئة عيارية متعامدة.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, u^*_{p_1}(x)\, u_{p_2}(x) = \delta(p_1 - p_2)$$

إن مؤثر كمية الحركة مثل الهامليتونيان له قيم خاصة حقيقية.

إن المؤثرات، التي لها قيم خاصة حقيقية، تسمى مؤثرات هيرميتان. ولأن كل المؤثرات الفيزيائية تشترط في هذه الصفة، فلهذا السبب توصف بمــؤثرات هيرميتية.

نظرية المفكوك وتماثلها مع المتجهات:

لمؤثر اختياري والذي يرمز له بـــ A، سيكون هناك دوال خاصة تطابق لقيم خاصة حقيقية a.

$$A u_a(x) = a u_a(x)$$

والدوال الخاصة تشكل فئة متعامدة ويمكن أن تصبح معايرة بحيث:

$$\int dx\, u_{a1}^*(x)\, u_{a2}(x) = \delta_{a_1, a_2}$$

والدوال الخاصة $u_a(x)$ تكون فئة كاملة والتي يمكن أن تحدد به لأن $u_a(x)$

$$\psi(x) = \sum_a C_a u_a(x)$$

من شرط المعايرة والتعامد:

$$C_a = \int dx\, u_a^*(x)\, \psi(x)$$

تفسير معاملات الفك:

أن تفسير C_a:

لو هناك مؤثر تم قياسه لتجمع من الأنظمة كل منها يوصــــف بدالــــة (x) والتي تكون معايرة للوحدة بحيث.

$$\int dx\, \psi^*(x)\, \psi(x) = 1$$

عندئذ:

1- نتيجة أي قياس معطى يمكن أن يكون فقط واحدة من القيمة الخاصة a.

2- احتمال أن القيمة الخاصة a أن توجد هو $|C_a|^2$

3- وكمقتضى لهذا التأويل فإن احتمال أن قيمة المؤثر A لنظام يكون لها واحد من القيمة الخاصة هو unity.

$$\sum_a |C_a|^2 = 1$$

وهذا ينتج من:

$$1 = \int dx\, \psi^*(x)\psi(x) = \int dx \left(\sum_a C_a^* u_a^*(x) \right) \psi(x) = \sum_a C_a^* C_a$$

وهذه المعادلة تعطى التالي:

$$\sum_a C_a C_a^* = \sum_a \int dx\, u_a^*(x)\psi(x) \int dy\, u_a(y)\psi^*(y) = \int\int dx\, dy\, \psi^*(y)\psi(x) \sum_a u_a(y) u_a^*(x) = 1$$
$$\Rightarrow \sum_a u_a(y) u_a^*(x) = \delta(x-y)$$

إن هذه الخاصية للدوال الخاصة توصف بــ العلاقة الكاملة وهي مطابقة لمنطوق نظرية المفكوك.

التناظر مع فضاء المتجه The Vector Space Analogy

المؤثرات والكميات المشاهدة operators and observables:

في فراغ (فضاء) المتجهات، المؤثر يحول transforms متجه إلى متجه آخر إن المؤثرات الخطية لها الخاصية.

$$A\left(\alpha_1\psi_1(x)+\alpha_2\psi_2(x)\right)=\alpha_1 A\psi_1(x)+\alpha_2 A\psi_2(x)$$

ولو كانت هذه المؤثرات تمثل كميات مشاهدة، فإنها يجب أن تكون هيرميتية. وللمؤثر الهيرميتي.

$$\langle A\rangle=\langle A\rangle^* \qquad \langle A\rangle-\langle A\rangle^*=0$$

أي أنه للحالة ψ

$$\int dx\,\psi^*(x)A\psi(x)=\int dx\,(A\psi(x))^*\psi(x) \qquad (a)$$

من هذا ينتج أن للمؤثرات الهيرميتية

$$\int dx\,\varphi^* A\psi=\int dx\,(A\varphi)^*\psi \qquad (b)$$

ولأي زوج من الدوال $\psi\ ,\ \varphi$

ولإثبات هذا، خذ.

$$\psi(x)=\varphi(x)+\lambda\psi(x)$$

حيث l هو ثابت مركب، عندئذ ينتج من المعادلة (a) أن:

$$\begin{aligned}\int dx\,\psi^*(x)A\psi&=\int dx\,(\varphi^*+\lambda^*\psi^*)A(\varphi+\lambda\psi)\\&=\int dx\,\varphi^*A\varphi+|\lambda|^2\int dx\,\psi^*A\psi\\&+\lambda\int dx\,\varphi^*Adx\,\varphi^*A\psi+\lambda^*\int\psi^*A\varphi\end{aligned}$$

المرافق لهذا هو

$$\int dx\,(A\psi\ddot{A}^{*}\,\psi = \int dx\left[A\,(\varphi+\lambda\psi)\,\right]^{*}\left[\,(\varphi+\lambda\,\psi)\,\right]$$
$$= \int dx\,(A\varphi\ddot{A}^{*}\,\varphi + |\lambda|^{2}\int dx\,(A\psi\ddot{A}^{*}\psi + \lambda^{*}\int dx\,(A\psi\ddot{A}^{*}\,\varphi + \lambda\int dx\,(A\varphi\ddot{A}^{*}\psi$$

والمؤثر هيرميت، الجوانب اليسرى من المعـــادلتين (c) , (d) والحـــدين الأولين متساويين. وبما أن $l^{*}\,,\,l$ معاملات مستقلة (هي مركبة) بإمكاننا تساوي معاملاتهم بانفصال، وينتج لنا المعادلة

ولو أن مؤثر A غير هيرميتي، فبإمكاننـــا تعريـــف المـــؤثر المرافـــق الهيرميتي hermitian conjugatioput A^{+}

$$\int dx\,(A\varphi\ddot{A}^{*}\,\psi = \int dx\varphi^{*}\,A^{+}\,\psi \qquad \otimes\otimes$$

وذلك لأي زوج من الدوال الموجية.

⊗ لاحظ أن للمؤثر الهيرميتي $A = A^{+}$

⊗ المؤثرات التبادلية $[A\,,B] = 0$

⊗ للمؤثرات الهيرميتية $(AB)^{+} = B^{+}\,A^{+}$

النهاية الكلاسيكية (التقليدية) للنظرية الكمية والاعتماد الزمني

Time Dependence The classical limit of Quantum theory

من الأسئلة المهمة التي نحن بصددها الآن هي النهاية التقليدية للنظرية الكمية. ولمناقشة هذه المسألة، فإننا نبدأ بدراسة التطور الزمني للقيم المتوقعة للمؤثرات المتغيرة مع الزمن. منها يمكن أن تتغير مع الزمن وذلك لأن المؤثرات لها اعتماد واضح على الزمن، على سبيل المثال، المؤثر $\alpha + pt/m$، وإنه يتغير مع الزمن، وذلك لأن القيمة المتوقعة تؤخذ بالنسبة للدالة الموجية التي بنفسها تتغير مع الزمن. لو كتبنا.

$$\langle A \rangle_t = \int \psi^*(x,t)\, A\, \psi(x,t)\, dx$$

عندئذ:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle A \rangle_t &= \int \psi^*(x,t)\frac{\partial A}{\partial t}\psi(x,t)\,dx \\
&\quad + \int \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t} A\, \psi(x,t)\, dx + \int \psi^*(x,t)\, A\, \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}\, di \\
&= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_t + \int \left(\frac{1}{i\hbar} H\psi(x,t)\right)^* A\,\psi(x,t)^{dx} + \int \psi^*(x,t)\, A \left(\frac{1}{i\hbar} H\psi(x,t)\right) \\
&= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar}\int \psi^*(x,t)\, H A\, \psi(x,t)^{dx} + -\frac{i}{\hbar}\int \psi^*(x,t)\, A H \psi(x,t)\, dx \\
&= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_t + \frac{i}{\hbar}\langle [H, A] \rangle_t
\end{aligned}$$

نلاحظ أنه إذا كان المؤثر A غير معتمد على الزمن بوضوح حينئذ = 0

$$\Rightarrow \frac{dA}{dt} = 0 = \left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle A \rangle_t = \frac{i}{\hbar}\langle [H, A] \rangle_t$$

وإذا كان المؤثر تبادلي مع H، فإن القيمة المتوقعة تكون دائماً ثابت.

وعليه فبإمكاننا أن نقول أن القيمة القياسية المشاهدة هي ثابت للحركــة. ولو أن الهاملتونيان هو واحد من الفئات الكاملة للمشاهدات المتبادلة، عندئذ كل المؤثرات تكون ثابت في الحركة.

خذ:

$$\begin{aligned} (1) \qquad & A = x \\ (2) \qquad & A = p \end{aligned}$$

أولاً:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle x\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle [H, x]\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{p^2}{2m} + v(x), \chi\right]\right\rangle \end{aligned}$$

c تتبادل مع أي دالة في c ، أي مثلاً v (x).

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad & [V(x), \chi] = 0 \\ & [p^2, \chi] = ? \\ & [p^2, \chi] = p[p, \chi] + [p, \chi]p \\ & \qquad = 2\frac{\hbar}{i}p \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle \chi\rangle = \frac{i}{\hbar}\cdot\frac{2\hbar}{i}\left\langle\frac{p}{2m}\right\rangle = \left\langle\frac{p}{m}\right\rangle \quad (a)$$

ثانياً:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle p\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle [H, p]\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{p^2}{2m} + v(x), p\right]\right\rangle \end{aligned}$$

P تتبادل مع أي دالة في p

$$\Rightarrow \quad = \frac{i}{\hbar}\langle [V(x), p]\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle [p, V(x)]\rangle$$

لحساب $[p, V(x)]$?

$$pV(x)\psi(x) - V(x)P\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}[V(x)\psi(x)] - \frac{\hbar}{i}V(x)\frac{d}{dx}\psi(x)$$
$$= \frac{\hbar}{i}V(x)\frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{\hbar}{i}\psi(x)\frac{dV(x)}{dx} - \frac{\hbar}{i}V(x)\frac{d\psi(x)}{dx}$$
$$= \frac{\hbar}{i}\frac{dV(x)}{dx}.\psi(x)$$
$$\Rightarrow [p, V(x)] = \frac{\hbar}{i}\frac{dV(x)}{dx}$$

وعليه:

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\frac{i}{\hbar}.\frac{\hbar}{i}\left\langle\frac{dV(x)}{dx}\right\rangle_t = -\left\langle\frac{dV(x)}{dx}\right\rangle_t \qquad (b)$$

باتحاد (a) , (b)

$$\frac{d}{dt}\langle\chi\rangle = \left\langle\frac{p}{m}\right\rangle \Rightarrow m\frac{d}{dt}\langle\chi\rangle = \langle p\rangle$$
$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle_t = \frac{d}{dt}.m\frac{d}{dt}\langle\chi\rangle = m\frac{d^2}{dt^2}\langle\chi\rangle_t = -\left\langle\frac{dV(x)}{dx}\right\rangle$$
$$\Rightarrow m\frac{d^2}{dt^2}\langle\chi\rangle_t = -\left\langle\frac{dV(x)}{dx}\right\rangle_t$$

هذه المعادلة تبدو مشابهة كثيراً لمعادلة الحركة لجسم تقليدي يتحرك في جهد $V(x)$

$$m\frac{d^2\chi}{dt^2} = -\frac{dV(x)}{dx}$$

والشيء الوحيد الذي يمنعنا أن نعمل التطابق $\chi = \langle\chi\rangle$ هو:

$$\left\langle\frac{dV}{dx}\right\rangle \neq \frac{d}{d\langle\chi\rangle}V(\langle\chi\rangle)$$

تمت الحيثيات والتي عندها المتطابقة السابقة تـصبح تقريبـاً متـساوية الحركة هي في الأساس تقليدية، كما تم ملاحظته أولاً بواسـطة hrenfen هـذا يلزم أن دالة الجهد تتغير ببطيء مع المتغير.

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{d\chi}$$

$$\Rightarrow F(x) = F(\langle\chi\rangle) + (x - \langle\chi\rangle)F'(\langle\chi\rangle) + \frac{(\chi - \langle\chi\rangle)^2}{2}F''(\langle\chi\rangle)$$

ولو أن اللاتعيين $(\Delta\chi)^2 = \langle(\chi - \langle\chi\rangle^2)\rangle$ صغيراً فإن الحدود العليا مـن الفـك يمكن إهمالها.

$$\langle F(\chi)\rangle \cong F(\langle\chi\rangle) + (\chi - \langle\chi\rangle)F'(\langle x\rangle)$$
$$\cong F(\langle\chi\rangle)$$

ولمجالات عينية macroscopic helve فـإن المعادلـة الأخيـرة تعتبـر صحيحة وهذا يجعلنا أن نحسب ونضيف مدار الإلكترون أو البروتون في تعجل باستخدام المعادلات التقليدية.

س/ إذا كان A , B مؤثرين هيرميتيين، أثبت أن:

1- المؤثر AB يكون هيرميتي فقط لو أن A , B يتبادليان، AB = BA

2- المؤثر $(A + B)^n$ هو كذلك هيرميتي.

الحل/

1- لمؤثرين هيرميتيين:

$$(AB)^+ = B^+ A^+ = BA$$

وهذا يساوي AB فقط لو كان AB = BA

-2

$$\left[(A+B)^n\right]^+ = (A+B)^+ (A+B)^+ \ldots\ldots\ldots (A+B)^+$$
$$= (A+B)(A+B)\ldots\ldots\ldots (A+B)$$
$$= (A+B)^n$$

س/ أثبت أن $A+A^+$, $i(A-A^+)$ يكونو هيرميبتان لأي مؤثر مثل AA^+

الحل/

$$(A+A^+)^+ = A^+ + (A^+)^+ = A^+ + A$$

$$\left[i(A-A^+)\right]^+ = (-i)\left(A^+ - (A^+)^+\right) = (-i)(A^+ - A)$$
$$= i(A-A^+)$$

$$(AA^+)^+ = (A^+)^+ A^+ = AA^+$$

س/ أثبت أنه إذا كانت H هو مؤثر هيرميتي، فإن المؤثر الهيرميتي المرافق لـ e^{iH} (والذي يعرف بـ $\sum_{n=0}^{\infty} i^n H^n/n!$) هو المؤثر e^{-iH}

الحل/

$$(e^{iH})^+ = \left(\sum_0^{\infty} \frac{i^n}{n!} H^n\right)^+ = \sum \frac{(-i)^n}{n!} (H^n)^+$$
$$= \sum \frac{(-i)^n}{n!} H^n = e^{-iH}$$

س/ خذ المؤثر الهيرميتي H والذي له الخاصية $H^4=1$

أوجد القيم الخاصة (الذاتية) للمؤثر H؟

أوجد القيم الخاصة (الذاتية) للمؤثر H لو أن H غير مقيد بأن يكون هيرميتي؟

الحل/ كون $H^4=1$

معناه $(H^4-1)\,\psi=0$ لكل قيم ψ

وهذا يمكن كتابته: $(H+1)(H-1)(H+i)(H-i)\,\psi=0$

وعليه فإن $(H-i)\psi=0$

وفي هذه الحالة $H\psi-i\psi=0 \Rightarrow H\psi=i\psi$

أي أن القيم الخاصة = i

أو $(H-i)\neq 0$

في هذه الحالة نضع $(H-i)\psi=\varphi$

$\Leftarrow$ $(H+1)\,(H-1)(H+i)\varphi\;=0$ في هذه الحالة

أما $\Rightarrow\;(H+i)\varphi=0$

$\Leftarrow$ القيمة الخاصة هي $-i$

أو أن $(H+i)\varphi=x$

$$\Rightarrow (H+1)(H-1)x=0$$

أما $(H-1)x=0$

$\Leftarrow$ القيمة الخاصة $(-1)\ldots\ldots\ldots\ldots+1$

وبهذه الطريقة وضحنا أن القيم الخاصة تكون $\pm1,\pm i$

إذا كان $H=H^+$

فإن القيم الخاصة يجب أن تكون حقيقية وعليه فالقيم الصحيحة هي ±1 فقط.

س/ وضح أنه إذا كان A هو مؤثر هيرميتي، فإن e^{iA} هو unitary لقد أثبت من قبل أنه لكل مؤثر هيرميتي $\left(e^{iH}\right)^{+}=e^{-iH}$

وعليه:

$$\left(e^{iA}\right)^{+}\left(e^{iA}\right)=e^{-iA},e^{iA}=1$$

ويمكن توضيح هذا كذلك من خلال معاملات لها قوى مختلفة في l

$$(1+i\lambda\lambda+\frac{(i\lambda i^{2}}{2!}H^{2}+\frac{(i\lambda i^{3}}{3!}H^{3}+.........)(1-i\lambda\lambda+\frac{(i\lambda i^{2}}{2!}H^{2}-\frac{(i\lambda i^{3}}{3!}H^{3}+.........)$$

س/ استخدم علاقات التبديل بين كمية الحركة p والموقع c محصول على المعادلات التي تصف اعتماد كل من $\langle c\rangle$ و $\langle p\rangle$ على الزمن، معطى الهاملتونيان.

$$(a)H=\frac{p^{2}}{2m}+\frac{1}{2}m(\omega_1^{2}\chi^{2}+\omega_{2\chi}+\in)$$

$$(b)H=\frac{p^{2}}{2m}+\frac{1}{2}m\,\omega^{2}\chi^{2}-\frac{A}{\chi^{2}}$$

الحل/

$$\frac{d}{dt}\langle\chi\rangle=\frac{i}{\hbar}[H,\chi]=\frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^{2}}{2m},\chi\right]=\frac{i}{\hbar}\frac{p}{m}\underbrace{[p,\chi]}_{\hbar/i}$$

$$=\frac{p}{m}$$

$$\frac{dp}{dt}=\frac{i}{\hbar}[H,p]=-\frac{i}{\hbar}\left[p,m\omega_1^{2}\chi^{2}/2+\omega_2\chi\right]$$

$$=-\frac{i}{\hbar},\frac{\hbar}{i}\left[2m\omega_1^{2}\frac{\chi}{2}+\omega_2\right]=-m\omega_1^{2}\chi-\omega_2$$

$$\frac{d^{2}x}{dt}=\frac{1}{m}\left[\frac{dp}{dt}\right]=-\omega_1^{2}\chi-\frac{\omega_2}{m}$$

والحل للمعادلة هو

$$\chi=-\frac{\omega_2}{m\omega_1^{2}}+x(0)\cos\omega_1 t+\frac{p(0)}{m\omega_1}\sin\omega_1 t$$

$$\frac{d\chi}{dt}=\frac{p}{m} \qquad (b)$$

$$\frac{dp}{dt}=-\frac{i}{\hbar}\left[p, m\omega^2\frac{x^2}{2}-\frac{A}{x^2}\right]=-m\omega^2\chi-\frac{2A}{x^3}$$

إلكترون يتذبذب في مجال كهربائي، وطاقته توصف بمؤثر لهاملتونيان.

$$H=\frac{p^2}{2m}-(eE_o\cos wt)\chi$$

احسب $\left(\frac{dH}{dt}\right),\left(\frac{dp}{dt}\right),\left(\frac{dx}{dt}\right)$

الحل/

$$\frac{dx}{dt}=\frac{i}{\hbar}[H,\chi]=\frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m},x\right]=\frac{i}{\hbar}\frac{p}{m}[p,x]=\frac{p}{m}$$

$$\frac{dp}{dt}=\frac{i}{\hbar}[H,p]=-\frac{i}{\hbar}\left[p,\frac{p^2}{2m}-(eE_o\cos\omega t)\chi\right]$$

$$=-\frac{i}{\hbar}[p,-(eE_o\cos\omega t)\chi]=-\frac{i}{\hbar},\frac{\hbar}{i}eE_o\cos\omega t=-eE_o\cos\omega t$$

$$\left\langle\frac{dH}{dt}\right\rangle=\left\langle\frac{\partial H}{\partial t}\right\rangle=eE_o\sin\omega t$$

معادلة شرودنجر في ثلاثة أبعاد:

The Schrödinger Equation in three Dimensions

الجهد المركزي: The Central Potential

في هذا الفصل سوف نناقش حالة مهمة والتي يكون فيها الجهد $V(x,y,t)$ يعتمد على $r=\sqrt{x^2+y^2+Z^2}$ فقط. ولنظام يتكون من جسيمين، حيث الجهد يعتمد على المسافة الفاصلة بينهما فقط، فإن الهاملتونيان له الشكل.

$$H=\frac{p_1^2}{2m_1}+\frac{p_2^2}{2m_2}+V(|r_1-r_2|) \qquad (1)$$

وبالتحليل العادي لمركز الكتلة والإحداثي النسبي.

$$\underline{R}=\frac{m_1\underline{r}_1+m_2\underline{r}_2}{m_1+m_2} \qquad (2)$$
$$\underline{r}=\underline{r}_1-\underline{r}_2$$

كمية الحركة الكلية والنسبية

$$\underline{p}=\underline{p}_1+\underline{p}_2$$
$$\underline{p}=\frac{m_2\underline{p}_1-m_1\underline{p}_2}{m_1+m_2} \qquad (3)$$

الهاملتونين يأخذ الشكل.

$$H=\frac{\underline{p}^2}{2M}+\frac{\underline{p}^2}{2M}+V(|\underline{r}|) \qquad (4)$$

هنا M هي الكتلة الكلية للنظام

$$M=m_1+m_2 \qquad (5)$$

الكتلة المختزلة (المخففة) μ

$$\mu=\frac{m_1 m_2}{M} \qquad (6)$$

بإمكاننا أن نتأكد من أن:

$$[p_i , R_j] \frac{\mathbf{h}}{i} sij$$

$$[p_i , r_j] \frac{\mathbf{h}}{i} sij \qquad (7)$$

وبما أن الجهد لا يعتمد على إحداثي مركز الكتلة R ، فإن مـؤثر كميـة الحركة الكلية P تبادلي مع H وبإمكاننا الحصول على الدوال الخاصة لكل من P و H الدوال الخاصة لـ P لها الشكل.

$$U(\underline{P},\underline{R}) = \frac{1}{(2\mathbf{D}\mathbf{h})^{3/2}} e^{i\underline{P}.\underline{R}/\mathbf{h}} \qquad (8)$$

والمعادلة الخاصة لـ H يمكن كتابتها على الصورة.

$$\psi(\underline{R},\underline{r}) = U(\underline{P},\underline{R})\, u_E(\underline{r}) \qquad (9)$$

حيث:

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} + V(r)\right) u_E(r) = E\, u_E(r) \qquad (10)$$

$$E = E_{tot} - \frac{P^2}{2M} \qquad , \qquad M = w$$

هي الطاقة الداخلية، بعد طرح طاقة الحركة للجسيمين.

يمكننا كتابة هذه المعادلة على الصورة

$$\left(-\frac{\mathbf{h}^2}{2\mu}\Delta_r^2 + V(\underline{r})\right) u_E(\underline{r}) = E\, u_E(\underline{r}) \qquad (1)$$

لاحظ أن هذه المعادلة لا تعتمد على اتجاه $\underline{r}$ أي لا تعتمد على θ أو f

نتائج عدم التغيير بالدوران Consequences of Rotational Invariance

في هذا الجزء سنوضح أن (11) يمكن أن تفصل بحيـث أن الإحـداثي الخطي r يظهر في معادلة طاقة القيمة الخاصة.

في الميكانيكا التقليدية، الفصل يعتمد على استخدام كمية الحركة الزاوية بأخذ:

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} \qquad (12)$$

$$\Rightarrow$$

$$\underline{L}^2 = (\underline{r} \times \underline{p}) \cdot (\underline{r} \times \underline{p}) = \underline{r}^2 \ \underline{p}^2 - (\underline{r} - \underline{p})^2$$

$$p^2 = \frac{1}{r^2} (\underline{r} \cdot \underline{p})^2 + \frac{1}{r^2} \underline{L}^2$$

$$= p_r^2 + \frac{1}{r^2} L^2 \qquad (13)$$

ولجهد مركزي (V تعتمد على r فقط) القوة تكون نصف قطرية radial ولا تبذل عزم على النظام. وهكذا فإن L ثابت للحركة، و L^2 فقط ولهذا فالمعادلة.

$$E = \frac{1}{2\mu} \underline{P}^2 + V(r)$$

تتضمن الإحداثيات الخطية فقط. ونفس الأمر صحيح في ميكانيكا الكم.

وفي هذا الفصل:

1- سنحدد مؤثرات كمية الحركة من احتياج أن الهاملتونين غير متغير تحت الدوران.

2- اشتقاق المعادلة الخطية.

عدم التغير تحت الدوران حول محول Z (لإثبات أن Δ^2 لا تعتمد على الدوران)

Invariance under Rotations about the z-axis

خذ حالة خاصة لدوران خلال زاوية θ حول محور Z

$$\chi' = \chi \cos\theta - y \sin\theta$$

$$y' = \chi \sin\theta - y \cos\theta \qquad (14)$$

بإمكاننا أن نرى أن

$$r'=(x'^2+y'^2+Z'^2)^{1/2}=(c^2+y^2+Z^2)^{1/2}=r$$
$$\left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2+\left(\frac{\partial}{\partial y'}\right)^2=\left(\cos q\,\frac{\partial}{\partial x}-\sin q\,\frac{\partial}{\partial y}\right)^2+\left(\sin q\,\frac{\partial}{\partial x}+\cos q\,\frac{\partial}{\partial y}\right)^2$$
$$=\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^2$$

وهذا يعني أن H لا يتأثر بالدوران وبما أن الهاملتونين له خاصـــة عــدم التغيير Invariace فنحن نتوقع قانون الحفظ، ولتحديد المؤثرات التي تتبادل مع H، خذ دوران متناهي في الصغر حول محور Z واحتفظ بالحدود لــ q فقط.

$$\chi'=\chi-\theta y$$
$$y'=y+x\theta \qquad (15)$$

نحن نلزم أن:

$$H U_E(x-\theta y,\ y+\theta x, Z)=E U_E(x-\theta y, y+\theta x, Z) \qquad (16)$$

ولو فككنا هذا للحد الأول في q وطرحنا منه $f(x+\Delta)=f(x)+\frac{af}{ax}(\Delta x)$

$$H U_E(x,y,Z)=E U_E(x,y,Z) \qquad (17)$$

نتحصل على:

$$H\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)U_E(x,t,z)=E\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)U_E(x,y,z) \qquad (18)$$

الجانب الأيمن في هذه المعادلة يمكن كتابته على الصورة.

$$\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)EU_E(x,y,z)=\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)HU_E(x,y,z) \qquad (19)$$

أي أن المؤثر $\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ تبادلي مع H.

لو عرفنا $\underline{L}=\underline{r}\ ,\ \underline{P}$ فإن:

$$L_z=\frac{\mathbf{h}}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)=xP_y-yP_x \qquad (20)$$

المعادلتين (18) و (19) معاً.

$$(H L_z - L_z H)\, U_E(x, y, z) = 0$$

بما أن $U_E(\underline{r})$ تكون فئة وهذا يعني أن علاقة المؤثر.

$$[H, L_z] = 0 \qquad (21)$$

تكون صحيحة. L_z هو المركبة $-z$ للمؤثر.

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{P} \qquad (22)$$

وهو كمية الحركة الزاوية. ولو أخذنا الدوران حول y, x بإمكاننا أن نجد العلاقات.

$$\begin{aligned} [H, L_x] &= 0 \\ [H, L_y] &= 0 \end{aligned} \qquad (23)$$

وهكذا، فإن مؤثرات كمية الحركة الزاوية الثلاثة متبادلة مـــع H أي أن كمية الحركة الزاوية ثابت في الحركة. وهذا يوازي النتيجة التقليدية من حيـــث أن القوى المركزية ينتج عنها حفظ كمية الحركة الزاوية.

علاقات التبديل لكمية الحركة الزاوية.

$$\left.\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_y] - [zp_y, zp_x] - [yp_z, xp_z] \\ &\qquad + [zp_y, xp_z] \\ &= y[P_z, z]\, P_x + x[z, p_z] p_y \\ &= \frac{\mathbf{h}}{i}(yp_x - xp_x) = i\mathbf{h} L_z \end{aligned}\right\} \qquad (24)$$

وبالمثل:

$$[L_y, L_z] = i\mathbf{h} L_x \qquad (25)$$

$$[L_z, L_x] = i\mathbf{h} L_y \qquad (26)$$

علاقات التبديل (24) و (26) يمكن تلخيصها بالقانون

$$\underline{L} \times \underline{L} = i\hbar \underline{L}$$

والنتيجة المتوقعة على علاقات التبديل هذه هي أنه توجد فقط مركبة واحدة لـ $\underline{L}$ يمكن اختيارها لتبادل مع H لتكون فئة من الكميات المشاهدة.

شرح مفصل للخطوة:

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] - [zp_y, zp_x] - [yp_z, xp_z] + [zp_y, xp_z]\end{aligned}$$

ولتوضيح هذا، نفترض أنه يوجد لدينا الدالة الخاصة للمؤثر L_x والذي له قيمة خاصة والتي هي تكون دالة خاصة للمؤثر Ly بقيمة خاصة L_2.

وهكذا باستطاعتنا اختيار فئة كاملة من الكميات المشاهدة المتبادلة للمؤثرات L^2, HL_z

فصل المتغيرات في معادلة شرودنجر

Separation of Variables is the Schrödinger Equation

في الفصل القادم (11) سنحدد القيم والدوال الخاصة للمؤثرات L^2, L_z، هنا سنوضح أن استخدامها يبسط كثيراً حل معادلة شرودنجر. وهذا ينتج من العلاقة المشتقة التالية:

$$\begin{aligned}\vec{L}^2 = (\vec{r} \times \vec{p})^2 &= [(\vec{r} \times \vec{p})_x]^2 + [(\vec{r} \times \vec{p})_y]^2 + [(r \times p)_z]^2 \\ &= -\hbar^2 \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ &\quad -\hbar^2 \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ &\quad -\hbar^2 \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ &= -\hbar^2 \left[x^2\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + y^2\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + z^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \right. \\ &\quad \left. - 2xy\left(\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}\right) - 2yz\frac{\partial^2}{\partial y \partial z} - 2zx\frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - 2x\frac{\partial}{\partial x} - 2y\frac{\partial}{\partial y} - 2z\frac{\partial}{\partial z} \right]\end{aligned}$$

$$\left(\vec{r}-\vec{p}\right)^2=-\mathbf{h}^2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$=-\mathbf{h}^2\,(x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+y^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}+z^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}+2xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+2yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}$$

$$+2zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}+x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z})\qquad(28)$$

$$=\mathbf{h}^2\{\ y\frac{\partial}{\partial z}\left(y\frac{\partial}{\partial z}\right)-y\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial}{\partial y}\right)-z\frac{\partial}{\partial y}\left(y\frac{\partial}{\partial z}\right)+z\frac{\partial}{\partial y}\left(z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$+z\frac{\partial}{\partial x}\left(z\frac{\partial}{\partial x}\right)-z\frac{\partial}{\partial x}\left(x\frac{\partial}{\partial z}\right)-x\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial}{\partial x}\right)+x\frac{\partial}{\partial z}\left(x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$+x\frac{\partial}{\partial y}\left(x\frac{\partial}{\partial y}\right)-x\frac{\partial}{\partial y}\left(y\frac{\partial}{\partial z}\right)-y\frac{\partial}{\partial x}\left(x\frac{\partial}{\partial y}\right)+y\frac{\partial}{\partial x}\left(y\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$=y\left[y\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]-y\left[z\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}+\frac{\partial}{\partial y}\right]-z\left[y\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}+\frac{\partial}{\partial z}\right]$$

$$+z\left[z\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]+z\left[z\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]-z\left[x\frac{\partial^2}{\partial x\partial z}+\frac{\partial}{\partial z}\right]-x\left[z\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}\right]$$

$$+x\left[x\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]+x\left[x\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]-x\left[y\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}+\frac{\partial}{\partial z}\right]$$

$$-y\left[x\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+\frac{\partial}{\partial y}\right]+y\left[y\frac{\partial^2}{\partial x\partial z}\right]$$

$$=y^2\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{\partial^2}{\partial x\partial z}\right]+x^2\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]+z^2\left[\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]$$

$$-2yz\left[\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}\right]-2zx\left[\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}\right]-2xy\left[\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\right]$$

$$-2y\frac{\partial}{\partial y}-2z\frac{\partial}{\partial z}-2x\frac{\partial}{\partial x}$$

ومجموع L^2 و $(r.p)^2$ يعطينا.

$$\vec{L}^2+\left(\vec{r}\cdot\vec{p}\right)^2=-\mathbf{h}^2\left(x^2+y^2+z^2\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\mathbf{h}^2\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\qquad(29)$$

$$\vec{L}^2+\left(\vec{r}\cdot\vec{p}\right)^2=\vec{r}\cdot\vec{p}+i\hbar\,\vec{r}\cdot\vec{p} \qquad (30)$$

لاحظ أننا نتعامل مع مؤثرات وعليه فإن المحافظة على ترتيب الحـــدود مهم جداً من (30).

$$p^2=\frac{1}{r^2}\left[L^2+\left(\vec{r}\cdot\vec{p}\right)^2-i\hbar\,\vec{r}\cdot\vec{p}\right] \qquad (31)$$

وهذه النتيجة تختلف من النتيجة التقليدية وذلك لأن $\vec{p}\cdot\vec{r}$ لا يتبادلا.

وباعتبار $p^2=\frac{1}{r^2}L^2-\hbar^2\frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}$

(لاحظ هنا أننا عوضنا عن $\vec{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}$) فإن معادلة شرودنجر تأخذ الشكل

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{\hbar^2 r^2}L^2\right]u_E(r)+V(r)u_E(r)=Eu_E(r)\# \qquad (33)$$

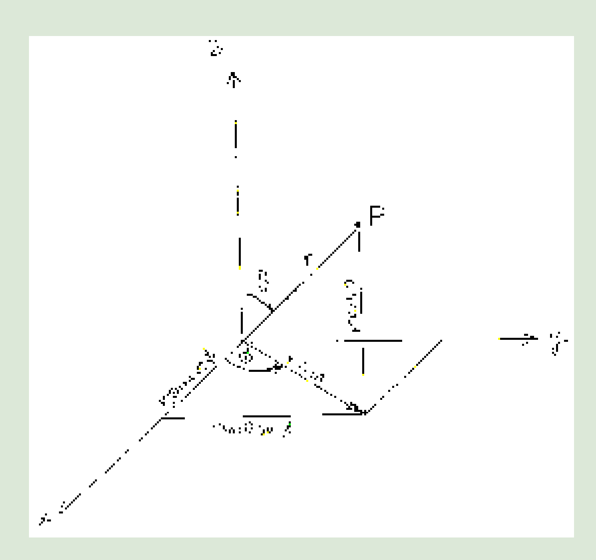
ولو أننا أخذنا الحسابات بالاحداثيات الكروية (الموضحة في الشكل) وهذا هو الطبيعي في هذه الحالة، حينئذ فإن المؤثر الوحيد الذي يحتوي على الزوايا الكروية y,θ هو L^2. ولهذا فلو أخذنا الدوال لها الشكل.

$$u_E(r)=Y_\lambda(\theta,\varphi)R_{E\lambda}(r) \qquad (34)$$

حيث

$$L^2Y_\lambda(\theta,\varphi)=\lambda Y_\lambda(\theta,\varphi) \qquad (35)$$

هي معادلة القيمة الخاصة للمؤثر L^2، عندئذ فإن المعادلة ستنفصل إلـــى (35) والمعادلة القطرية (الخطية) (39) لاحقاً.



الشكل أعلاه يبين الإحداثيات الكروية، والعلاقة بين الإحداثيات الكارتيزية (x,y,z) والكروية (r, o, y).

إن الطريقة المتبعة هنا لا تختلف عن الطريقة العادية المتعارف عليها في فصل المتغيرات. ولكن هنا نؤكد على دور التماثل symmetry في تحديد الفئة الواصلة للمؤثرات المتبادلة (التبادلية) commuting epertes.

نرى أنλ لها أبعاد $\mathbf{h}^2$، ونكتبها بالشكل.

$$l = l(l+1)\mathbf{h}^2 \qquad (36)$$

في الفصل القادم سنثبت أن $l = 0, 1, 2, 3, ...$ ونستخدم هذه الحقيقة في الأجزاء التالية. سنكتب الدوال الخاصة لكمية التحرك الزاوي على الصورة $Y_{lm}(\theta,\varphi)$، حيث l تدل على $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ هي كذلك دالة خاصة للمؤثر $\lfloor^2$ و $\lfloor_z$.

$$\lfloor_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\mathbf{h}\, Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (37)$$

وسنجد كذلك أن m هو رقم صحيح $-l \le m \le l$

وبما أن Y_{lm} هي دوال خاصة لمؤثرات هيرميتية، فإننا نتوقع أن Y_{lm} التي تناظر قيم خاصة مختلفة تكون متعامدة. وسنثبت في الفصل القادم أن عندما يكون هناك معايرة حقيقية، والتكامل على مدى المتغيرات f, q.

$$\int d\Omega\, Y_{l_1 m_1}(\theta,\varphi)^* Y_{l_2 m_2}(\theta,\varphi) = \int_0^{D} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2D} d\varphi\, Y_{l_1 m_1}(\theta,\varphi)^* Y_{l_2 m_2}(\theta,\varphi) = S_{l_1 l_2} S_{m_1 m_2} \qquad (38)$$

المعادلة النصف قُطرية The Radial Equation

عندما نعوض (35) و (36) في (33) و (34)، فإننا نتحصل على النصف قطرية.

$$-\frac{\mathbf{h}^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{Elm}(r)+V(r)R_{Elm}=R_{Elm}(r) \qquad (39)$$

لاحظ أنه لا يوجد اعتماد على m في هذه المعادلة. وعليه، فإنه لقيمة معطاه l سيكون هناك $(2l+1)$ من التكرار deglnemacy، وذلك لأن كل قيم m الممكنة سيكون لها نفس الطاقة. ولهذا حذفنا m من المعادلات النصف قطرية وهذه المعادلة يمكننا كتابتها على الصيغة.

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_{nl}(r)-\frac{2\mu}{\mathbf{h}^2}\left[V(r)+\frac{l(l+1)\mathbf{h}^2}{2\mu r^2}\right]R_{nl}(r)+\frac{2\mu E}{\mathbf{h}^2}R_{nl}=0 \qquad (40)$$

حيث استبدلنا الرمز E بالرمز n في الدالة الخاصة $R_{ne}(r)$. وسنقوم باختبار هذه المعادلة للعديد من أشكال الجهد مقيدة بالشرط أنها تصير إلى الصفر عند ∞ أسرع من $\frac{1}{r}$ ما عدا للحالة المهمة الخاصة لجهد كولوم Coulomb potential والذي سيناقش في الفصل (12). وسنفترض كذلك أن الجهد ليس مفرد Singular.

كفردية $\frac{1}{r}$ عند نقطة الأصل،

$$\lim_{r\to o} r^2 V(r)=0 \qquad (41)$$

وإنه من المناسب أحياناً أن نستحدث الدالة.

$$u_{nl}(r) = r R_{nl}(r) \qquad (42)$$

وبما أن:

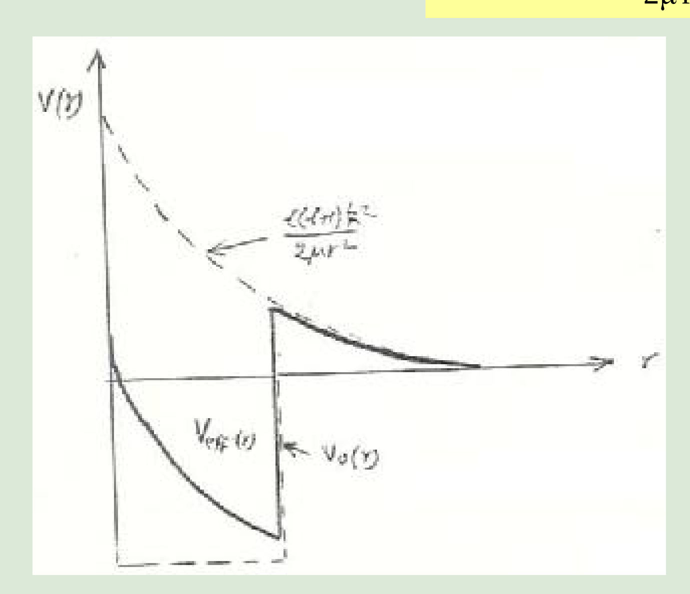
$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)\frac{u_{re}(r)}{r}=\frac{d}{dr}\left[-\frac{u}{r^2}+\frac{1}{r}\frac{du}{dr}\right]+\frac{2}{r}\left[-\frac{u}{r}+\frac{1}{r}\frac{du}{dr}\right]$$
$$=\frac{2}{r^3}u-\frac{1}{r^2}\frac{du}{dr}+\frac{1}{r}\frac{d^2u}{dr^2}-\frac{1}{r^2}\frac{du}{dr}-\frac{2u}{r^3}+\frac{2}{r^2}\frac{du}{dr}$$
$$=\frac{1}{r}\frac{d^2u}{dr^2} \qquad (43)$$

∴ معادلة شرودنجر يمكننا كتابتها الآن (مع ضرب طرفيها في r)

$$\frac{d^2u_{re}(r)}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u_{nl}(r)=0 \qquad (44)$$

وهذه تبدو مشابهة للمعادلة في بعد واحد ما عدا

(a) أن الجهد $V(r)$ تغير بإضافة الحاجز المركز المُنَفِّر repulsive centrifugal barrier. $V(r)\to V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$



الشكل: الجهد الفعال المؤثر في المعادلة النصف قطريـــة لـــــ $u=rR(r)$ عندما يكون الجهد الحقيقي مربع.

(b) التعريف للدالة $u_{nl}(r)$ ومحدودية الدالة الموجية عند نقطة الأصل يلزم

أن: $u_{nl}(0)=0$

مما يجعلها مثل مسألة البعد الواحد الذي له $V=r\infty$ في الجانب الأيسر.

أولاً: نعتبر المعادلة النصف قطرية قريباً من الأصل Origin، وبإسقاط u_{nl}

عندما $r \to o$ فإن الحدود المهيمنة في المعادلة.

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}u \simeq o \qquad (47)$$

وبالتعويض Ansatz

$$u(r) \sim r^s$$

سنجد أن المعادلة تكون صحيحة بشرط أن:

$$s(s-1)-l(l+1)=0$$

أي أن $s=l+1$ أو $s=-l$

والحل الذي يحقق الشرط $u(o)=0$ أي الحل الذي يسلك مثل r^{l+1} يسمى الحل المنتظم regular sohtim الحل الذي يسلك مثل r^{-l} هو الذي الغير منتظم irregnlar وبدلالة المعادلة النصف قطرية $R(r)$ لدينا الحل المنتظم يسلك مثل والحل الغير منتظم يسلك مثل

عندما تكون r كبيرة بإمكاننا إهمال حدود الجهد والمعادلة تصبح.

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}u = 0 \qquad (50)$$

وشرط مربع التكامل

$$1=\int d^2r|\psi(r)|^2 \int_o^\infty r^2\,dr\int d\Omega|R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,j)|^2 \qquad (51)$$

$$= \int_o^\infty r^2\,dr\,|R_{nl}(r)|^2$$

أي:

$$\int_o^\infty dr|u_{nl}(r)|^2 \qquad (52)$$

لكي تتلاشى الدالة عند ∞

* في حالة $E < 0$

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\alpha^2 \qquad (53)$$

الحل المقارب $\frac{d^2u}{dr^2} + a^2 u = 0$

$$u(r) \sim e^{-\alpha r} \qquad (54)$$

* في حالة $E > 0$

لدينا الحلول والتي تكون معايرة في داخل صندوق.

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2 \qquad (55)$$

$$\frac{d^2u}{dr^2} - u^2 = 0$$

الحل عندما تكون g كبيرة بحيث أن $V(r)$ مهملة يكون هو اتحاد خطـــي من e^{ikr} و e^{-ikr}.

ذرة الهيدروجين The Hydrogen Atom

ذرة الهيدروجين أبسط ذرة وذلك لأنها تحتوي على إلكترون واحد. ولهذا السبب تصبح معادلة شرودنجر معادلة جسم واحد وذلك بعد فصل حركة مركز الكتلة وسوف نتعامل مع ذرات مشابهة للهيدروجين، أي أن الذرات التي تحتوي على إلكترون واحد فقط، ولكن سنسمح تحتوي على أكثر من بروتون واحد. والجهد في هذه الحالة يكون

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \qquad (1)$$

ومعادلة شرودنجر النصف قطرية تكون

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]R = 0 \qquad (2)$$

وسنركز الدراسة على الحالات المقيدة، أي حلول $E < 0$ إنه من المناسب أن نعمل تغيير في المتغيرات.

$$d = \left(\frac{8m|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2} r \qquad (3)$$

في هذه الحالة تصبح المعادلة (2) على الصورة التالية:

$$\frac{d^2R}{dd^2} + \frac{2}{d}\frac{dR}{dd} - \frac{l(l+1)}{d^2}R + \left(\frac{l}{d} - \frac{1}{4}\right)R = 0 \qquad (4)$$

وقد استحدثنا المعامل (بدون وحدة)

$$\lambda = \frac{Ze^2}{\hbar}\left(\frac{\mu}{2|E|}\right)^{1/2} = Z\alpha\left(\frac{\mu C^2}{2|E|}\right)^{1/2} \qquad (5)$$

المعادلة (4) من السهل حلها. وذلك $a = \frac{1}{137}$، والطاقة مُعبر عنها بوحدات الكتلة عند السكون rest – mass .

طيف الطاقة The Energy Spectrum

سنحاول حل معادلة (4) بطريقة معروفة لدينا الآن. أولاً سـنجد سـلوك الدالة عندما تكون d كبيرة. وعندما تكون d كبيرة فالحدود المتبقية في المعادلة.

$$\frac{d^2R}{d\delta^2} - \frac{1}{4}R = 0 \qquad (6)$$

والحل المقبول عند ما لا نهاية

$$R \sim e^{+d/2} \Leftarrow \text{عند} \quad d \to \infty \Rightarrow R \to \infty$$

$$R \sim e^{-d/2}$$

وكما عالجنا المتذبذب التوافقي

$$R = e^{-\frac{d}{2}} G(d) \qquad (7)$$

وبالتعويض في المعادلة (4)

سنتحصل على معادلة لـ G (s):

$$\frac{d^2G}{d\delta^2} - \left(1 - \frac{2}{\delta}\right)\frac{dG}{d\delta} + \left[\frac{\lambda - 1}{\delta} - \frac{l(l+)}{\delta^2}\right] G = 0 \qquad (8)$$

والآن نكتب مفكوك القوة لـ $G(d)$ والتي تأخذ الشكل:

$$G(d) = d^{l} \sum_{n=o}^{\infty} a_n d^n \qquad (9)$$

وبتعويض المعادلة (a) في المعادلة التفاضلية، سنجد العلاقة بين المعاملات المختلفة a_n ومعادلة الاستطراد يمكن الحصول عليها من المعادلة التفاضلية الخاضعة للعلاقة

$$H(\delta) = \sum_{n=o}^{\infty} a_n \delta^n \qquad (10)$$

والتي تكون

$$\frac{d^2H}{d\delta^2}+\left(\frac{2l+2}{\delta}-1\right)\frac{dH}{d\delta}+\frac{\lambda-1-l}{\delta}H=0 \qquad (11)$$

وهذه المعادلـــة يمكننـــا الحـــصول عليهـــا بـــسهولة وذلـــك بتعـــويض

$G(d)=d^{l}H(p)$ في معادلة (8)

في هذه الحالة:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[n(n-1)a_n\delta^{n-2}+na_n\delta^{n-1}\left(\frac{2l+2}{\delta}-1\right)+(\lambda-1-l)a_n\delta^{n-1}\right]=0 \qquad (12)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left\{(n+1)\left[na_{n+1}+(2l+2)a_{n+1}\right]+(\lambda-1-l-n)a_n\right\}\delta^{n-1}=0$$

وبما أن هذه المعادلة تتلاشى حد بحد، وسنتحصل على معادلة الاستطراد.

$$\frac{a_{n+1}}{a_n}=\frac{n+l+1-l}{(n+1)(n+2l+2)} \qquad (13)$$

ولقيم كبيرة لقيمة n فإن النسبة تصبح

$$\frac{a_{n+1}}{a_n}\approx\frac{1}{n} \qquad (14)$$

وكما فعلنا في حالة المتذبذب التوافقي، فإننا لن نتحصل على سلوك مقبول للدالة $R(p)$ عند ∞ إلا إذا انتهت السلسلة (a) أي أنه لقيمة معطاة لــ l و $n=nr$ يجب أن نتحصل على.

دعنا الآن نستحدث الرقم الكمي الأساسي N المعرف بــ

$$n=n_r+l+1 \qquad (16)$$

وينتج من الحقيقة أن $n_r\geq 0 \Leftarrow$

1. $n\geq l+1$

2. n is au int eger

$$E = -\frac{1}{2} m c^2 \frac{(Za)^2}{n^2} \qquad (14)$$

$$E = \mathbf{h} w$$

وهذه النتيجة شبيهة بنموذج بور. لاحظ أن الكتلة المختزلة m التي تظهر في المعادلة. إن وجود الكتلة المختزلة.

$$m = \frac{mm}{m+M} \qquad (18)$$

حيث m كتلة الإلكترون، و M كتلة النواة، يعني أن الترددات.

$$\omega iy = \frac{Ei - Ej}{\mathbf{h}} = \frac{mC^2/2\mathbf{h}}{1+\frac{m}{M}} (Z\alpha)^2 \left(\frac{1}{n^2 \int} - \frac{1}{n^2 \int} \right) \qquad (19)$$

والذي يختلف قليلاً لاختلاف ذرات الهيدروجين الشبيهة علـــى الأخـــص الفرق بين طيف ذرة الهيدروجين وذرة الديتويروم.

ظاهرة تحلل الطيف The Degeneracy of the spectrum

الآن سنناقش تحلل طيف الطاقة

لقيمة $l=1$، الحالة الدنيا، يجب أن يكون (من المعادلة $l=n_r+l+1$ و $n_r=o, l=0$. هذا يعني أنه توجد حالة وحيدة فريدة للحالة الدنيا ground stale إذا أخذنا $l=2 \Leftarrow$ يكون عندنا احتماليين

$$\begin{aligned}&(i)\ n_r=1,\ l=0\\&(ii)\ n_r=0,\quad l=1\end{aligned}$$

بالنسبة للحالة الأولى $(i)\ n_r=1, l=0$ فإن المعادلة (13)، تكتب بالشكل

$$\begin{aligned}\frac{a_{n+1}}{a_n}&=\frac{n+l+1-l}{(n+1)(n+2l+2)}=\frac{n+l+1-n_r-l-1}{(n+1)(n+2l+2)}\\&=\frac{n-n_r}{(n+1)(n+2l+2)}\qquad(20)\end{aligned}$$

وهذا يبين أن:

$$\begin{aligned}&\frac{a_1}{a_o}=\frac{-1}{(o+o+2)}=\frac{-1}{1\times 2}\Rightarrow a_1=-\frac{a_o}{2}\\&\Rightarrow H(\delta)=\sum_{n=o}^{\infty}a_n\delta^n=a_o\delta^o+a_1\delta^1\\&\qquad\qquad=a_o+\left(-\frac{a_o}{2}\right)\delta\\&H(\delta)\qquad=a_o\left(1-\frac{\delta}{2}\right)\qquad(21)\end{aligned}$$

بينما التوزيع الزاوي متماثل كروياً

لنأخذ الحالة الثانية. $(ii)\ n_r=0, l=1$

هنا الدالة النصف قطرية ثابتة

$$H(d)=a_o$$

لكن الجزء الزاوي من الدالة الموجية يتضمن $Y_{1m}(o,j)$.

التحلل يكون $(2l+1)$ وعليه يوجد ثلاث من مثل هذه الحالات.

التحلل الكلي للحالة $l=n=2$ يكون $3+1=4=2^2$ في حالة $l=3$ يوجد لـــدينا الاحتمالات التالية: $n_r=2, l=0$

هنا يوجد حالة واحدة والتي لها $\frac{a_2}{a_1}=-\frac{1}{6}$ و $\frac{a_1}{a_o}=-1$ وعليـــه فـــإن الدالـــة النصف قطرية تتضمن.

$$H(d)=a_o\left(1-d+\frac{1}{6}d^2\right) \qquad (22)$$

$n_r=1 \ , l=1$ لها ثلاث حالات، بـــ $H(d)=a_o\left(1-\frac{d}{4}\right)$،

بينما $n_r=0 \ , l=2$ لها $5=(2l+1)$ حالات بـــ $H(d)=a_o$

وهكذا يوجد $1+3+5=9=3^2$ تحلل للحالات التي لها قيمة خاصـــة (ذاتيـــة) $l=n=3$ وبشكل عام، التحلل في حالة $l=n$ يكون $1+3+5+\ldots+[2(n-1)+1]=n^2$

ومسبقاً نحن توقعنا تحلل $(2l+1)$ للجهـــد النـــصف قطـــري، وذلـــك لأن الهاملتونيان النصف قطري لا يعتمد على $\square_z$، ولكن يعتمد على $\square^2$.

هنا يوجد تحلل إضافي. والتحلل الخاص صفة مميزة للجهد $\frac{1}{r}$.

The Radial Eigen functions الدوال الذاتية النصف قطرية

بالرجوع للدالة التفاضلية. لو عوضنا $l = n$ في علاقة الاستطراد (13) بحيث:

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1-n}{(k+1)(k+2l+2)} a_k \qquad (26)$$

سنجد أن:

$$a_{k+1} = (-1)^{k+1} \frac{n-(k+l+1)}{(k+1)(k+2l+2)} \cdot \frac{n-(k+l)}{k\,(k+2l+1)} \cdots\cdots \frac{n-(l+1)}{1.\,(2l+2)} a_o \qquad (27)$$

بمساعدة هذه العلاقة بإمكاننا الحصول على مفكوك سلسلة القوس للدالة $H(d)$. وما يكافئ هذا.نجد أن المعادلة لـ $H(d)$تكون لمعقدة الحدود

$$H(d) = L_{n-l-1}^{(2l+1)}(d) \qquad (28)$$

وبعدما نُحَول بالعكس للوصول للإحداثيات النصف قطرية r وبعد المعايرة نجد أن الدوال النصف قطرية الأولى يمكن كتابتها على الصورة

$$\left.\begin{aligned}
&R_{nl}(r): \qquad \left(a_o = \frac{\hbar}{m\,c\,a}\right)\\
&R_{10}(r) = 2\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-\frac{zr}{a_o}}\\
&R_{20}(r) = 2\left(\frac{z}{2a_o}\right)^{3/2}\left(1-\frac{zr}{2a_o}\right)e^{-\frac{zr}{2a_o}}\\
&R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{z}{2a_o}\right)^{3/2}\left[1-\frac{2zr}{3a_o}+\frac{2(zr)^2}{27a_o^2}\right]e^{-\frac{zr}{3a_o}}\\
&R_{30}(r) = 2\left(\frac{z}{3a_o}\right)^{3/2}\left[1-\frac{2zr}{3a_o}+\frac{2(zr)^2}{27a_o^2}\right]e^{-\frac{zr}{3a_o}}
\end{aligned}\right\} 12-30$$

رسم كثافة الاحتمال النصف قطري $P(r)$ لوجود الإلكترون عند مسافة r من نقطة الأصل يمكن إيجاده من هذه الدوال الموجية كما هو موضح بالـــشكل (12-2) يجب أن نتذكر أن الدالة الموجية لها جزء زاوي، الذي مربعه المطلق يكون $P_e^m(\cos q)^2$ الرسومات لدوال ليجندر المشاركة $P_e^m(\cos q)^2$ موضحة بالرسم .(12-3)

وبمعرفة الدوال الموجية بإمكاننا حساب القيمة المتوقعة.

$$\langle r^k \rangle = \int_o^\infty dr\, r^{2+k} \left[R_{nl}(r)\right]^2$$

وهذه بعض القيم المتوقعة المفيدة.

$$\left.\begin{aligned}
\langle r \rangle &= \frac{a_o}{2z}\left[3n^2 - l(l+1)\right] \\
\langle r^2 \rangle &= \frac{a_o^2 n^2}{2z^2}\left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right] \\
\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle &= \frac{z}{a_o n^2} \\
\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle &= \frac{z^2}{a_o^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)}
\end{aligned}\right\} (12-36)$$